Magnons et surstructures magnétiques d'interface

Bahram Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski

► To cite this version:

Bahram Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski. Magnons et surstructures magnétiques d'interface. Journal de Physique, 1975, 36 (9), pp.835-849. 10.1051/jphys:01975003609083500 . jpa-00208322

HAL Id: jpa-00208322

<https://hal.science/jpa-00208322>

Submitted on 1 Jan 1975

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
 Physics Abstracts
 7.810 — 8.560

MAGNONS ET SURSTRUCTURES MAGNÉTIQUES D'INTERFACE

B. DJAFARI-ROUHANI

Section d'Etudes des interactions Gaz-Solides
 Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
 B.P. 2, 91190 Gif-sur-Yvette, France

et

L. DOBRZYNSKI

Physique des Solides (*) I.S.E.N.
 3, rue François-Baës,
 59046 Lille Cedex, France

(Reçu le 25 février 1975, accepté le 17 avril 1975)

Résumé. — Nous étudions, dans un modèle simple, les magnons localisés à l'interface de deux ferromagnétiques de Heisenberg ainsi que la stabilité ferromagnétique de l'interface.

Nous considérons des cristaux cubiques simples ayant la même distance interatomique et la même valeur de spin sur chaque site dans l'état fondamental mais différant par les valeurs de leurs intégrales d'échange entre atomes premiers et seconds voisins. Une interface s'obtient par le couplage de deux cristaux semi-infinis possédant la même surface cristallographique.

Nous étudions d'abord sur les interfaces (001) la condition d'existence des magnons localisés ainsi que les lois de dispersion des modes localisés et résonnants dans les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin. Nous déterminons ainsi l'effet des interactions à l'interface sur l'évolution de tels modes.

Ensuite, nous montrons la possibilité d'existence de surstructures magnétiques sur les interfaces (110). Une telle instabilité se traduit par l'existence d'un mode *mou* de magnon localisé à l'interface.

Abstract. — We study, in a simple model, the localized magnons at an interface between two Heisenberg ferromagnets and also the ferromagnetic stability at the interface.

We consider simple cubic crystals having the same lattice parameter and the same spin value in the fundamental state on each site, but different exchange integrals between first and second nearest neighbours. We define an interface by coupling two semi-infinite crystals having the same crystallographic surface.

We first study the conditions for the existence of localized magnons at (001) interfaces as well as the dispersion curves of localized and resonant magnons in the high symmetry directions of the Brillouin zone. We also determine the effect of the interface interactions on these modes.

Then, we show that magnetic superstructures may exist at (110) interfaces. Such an instability is given by the existence of a soft localized mode at the interface.

1. Introduction. — Dans cet article, nous étudions l'existence de modes localisés de magnons à l'interface de deux ferromagnétiques de Heisenberg et leur stabilité. Nous étendons ainsi au cas des interfaces entre deux cristaux des études analogues effectuées pour un cristal présentant une surface libre.

Wallis *et al.* [1] ont montré que lorsqu'un cristal ferromagnétique du type Heisenberg se termine par une surface libre, il peut exister des états localisés sur celle-ci. L'existence de ces modes dépend de la

nature du cristal (c'est-à-dire de sa structure cristalline et des valeurs des intégrales d'échange) ainsi que de l'orientation de la surface. Par exemple pour un cristal cubique simple et avec des interactions d'échange entre premiers (J_1) et seconds voisins (J_2) il n'existe des modes localisés sur une surface (001) que lorsque $J_1 > 0$ et $J_2 > 0$ tandis qu'il en existe toujours sur une surface (110). (Les interactions d'échange sont supposées ici identiques à la surface et en volume.)

Plus récemment, quelques études [2, 3] ont porté sur la stabilité magnétique d'une surface terminant

(*) Equipe de recherche du C.N.R.S.

un cristal ferromagnétique. Si en un point de la zone de Brillouin à deux dimensions de la surface il existe un magnon de fréquence négative, une instabilité apparaît donnant lieu à une *surstructure* magnétique. Le concept de magnons *mous* a d'abord été introduit par Trullinger *et al.* [2] en supposant que les intégrales d'échange en surface sont différentes de celles en volume, ce qui est par exemple le cas d'une couche adsorbée magnétique. Blandin [3] a étudié le problème de la stabilité d'une surface propre en supposant que les intégrales d'échange y restent identiques à celles en volume. Son étude qualitative montre la possibilité d'existence de surstructure pour un cristal ferromagnétique tel que EuO pour lequel des expériences de photoémission suggèrent [4] l'existence d'une couche paramagnétique en surface.

Une instabilité magnétique peut s'expliquer de la façon suivante [2, 3] : nous savons que pour un arrangement de spin décrit par l'hamiltonien de Heisenberg, la nature de l'état fondamental s'obtient en calculant le maximum de $J(q)$, transformée de Fourier des interactions d'échange [5]. L'état fondamental est ferromagnétique si ce maximum correspond à $q = 0$. Ainsi un cristal cubique simple est ferromagnétique si $J_1 > 0$ et $J_1 + 4J_2 > 0$ (Fig. 7). A la limite de la région ferromagnétique un magnon devient mou et rend donc instable cet arrangement. Soit de façon générale $\mathcal{D}$ le domaine du plan (J_1, J_2) où une structure cristalline infinie est stable vis-à-vis de l'état ferromagnétique. Si nous considérons le plan de la surface seul (cristal à deux dimensions) il est stable vis-à-vis du ferromagnétisme dans un domaine $\mathcal{D}'$ du plan (J_1, J_2) .

Si $\mathcal{D}'$ est inclus dans $\mathcal{D}$ et si l'on se place en un point de $\mathcal{D}$ non contenu dans $\mathcal{D}'$, nous sommes dans un cas favorable pour l'obtention de modes *mous*. En effet dans ce cas le plan de la surface tend à avoir un arrangement non ferromagnétique tandis que l'interaction avec l'intérieur du cristal tend à lui imposer l'état ferromagnétique. Par exemple [6] une surface (001) d'un cristal cubique simple a un état de base ferromagnétique si $J_1 > 0$ et $J_1 + 2J_2 > 0$; par contre une surface (110) est stable dans l'état ferromagnétique lorsque $J_1 > 0$ et $J_2 > 0$. Contrairement à la surface (001), la surface (110) peut donc présenter une surstructure et ceci lorsque

$$J_2 < 0 \quad \text{et} \quad J_1 + 4J_2 > 0.$$

Nous allons étudier ici les deux aspects, existence et stabilité, du problème de modes localisés de magnons aux interfaces de deux ferromagnétiques de Heisenberg. Nous effectuons cette étude sur un modèle simplifié qui permet d'obtenir quelques résultats qualitatifs.

Les cristaux sont supposés cubiques simples avec la même distance inter-atomique a ainsi que la même valeur absolue de spin S et la même orientation de spin dans l'état fondamental sur chaque atome. Ils diffèrent uniquement par les valeurs de leurs

intégrales d'échange supposées non nulles entre premiers et seconds voisins (J_{1A} et J_{2A} pour le premier cristal, J_{1B} et J_{2B} pour le second).

Nous créons une interface en couplant deux cristaux semi-infinis terminés par une même surface cristallographique à l'aide d'interactions d'échange J'_1, J'_2 . Ce modèle est représenté schématiquement pour une interface (001) sur la figure 1.

FIG. 1. — Représentation schématique du modèle d'interface (001) entre deux cristaux cubiques simples.

Un cas particulier d'une interface est celui d'un défaut plan, c'est-à-dire d'une interface entre deux cristaux identiques ($J_{1A} = J_{1B} = J_1, J_{2A} = J_{2B} = J_2$). Beaucoup de résultats qualitatifs relatifs aux interfaces peuvent se déduire de l'étude du défaut plan qui présente, par ailleurs, l'avantage de pouvoir être traité analytiquement jusqu'au bout. Aussi nous porterons plus particulièrement notre attention sur l'étude de défauts plans.

Remarquons enfin que le problème d'une surface libre peut être traité comme un cas particulier de celui d'un défaut plan où les interactions couplant les deux cristaux semi-infinis sont annulées ($J'_1 = J'_2 = 0$).

Mathématiquement, nous utilisons une méthode de fonctions de Green [7] pour déduire les fréquences des modes localisés. Cette méthode a déjà été utilisée pour l'étude des phonons d'interfaces par Masri et Dobrzynski [8, 9]. Nous rappelons cette méthode au paragraphe 2 en introduisant parallèlement quelques notations employées dans la suite du texte.

Au paragraphe 3 nous appliquons le modèle précédent aux interfaces (001). Nous étudions la condition d'existence et la loi de dispersion des modes localisés en fonction des paramètres de couplage à l'interface. Une large part sera accordée à l'étude qualitative de défauts plans.

Pour montrer la possibilité d'existence de surstructures, nous appliquons au paragraphe 4 le modèle précédent aux interfaces (110). Nous obtenons le domaine du plan (J_1, J_2) où une instabilité peut apparaître en fonction des paramètres caractérisant l'interface.

2. **Formalisme général.** — Considérons un cristal cubique simple décrit par l'hamiltonien de Heisenberg

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{ll'} J_{ll'} S_l \cdot S_{l'}$$

où nous retenons uniquement les interactions d'échange jusqu'aux seconds voisins.

La transformation de Holstein-Primakoff [10] linéarisée permet de mettre l'hamiltonien sous la forme :

$$\mathcal{H}_0 = -S \sum_{ll'} J_{ll'} (b_l^\dagger b_{l'} + b_{l'}^\dagger b_l + b_l^\dagger b_l + b_{l'}^\dagger b_{l'}) + \text{Cte.}$$

où $b_l^\dagger$ et b_l , opérateurs de création et d'annihilation d'excitations élémentaires sur l'atome situé au site l , obéissent aux règles de commutation des bosons.

Les équations du mouvement des opérateurs $b_l^\dagger$ pour un cristal infini peuvent se condenser sous la forme matricielle :

$$(\mathcal{H}_0 - \omega I) (\mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

où $(\mathbf{u})$ est un vecteur colonne à N lignes (où N est le nombre d'atomes du cristal) représentant l'ensemble des opérateurs $b_l^\dagger$. A partir d'un cristal infini nous pouvons créer un défaut plan en changeant de (J_1, J_2) à (J'_1, J'_2) les interactions entre les atomes situés de part et d'autre d'un plan parallèle à un plan cristallographique.

Soit $\mathcal{H}_D = \mathcal{H}_0 + V_D$ le nouvel hamiltonien du système. Il permet de décrire les nouvelles équations du mouvement des opérateurs $b_l^\dagger$ de façon analogue à (1). Un cas particulier du défaut plan est celui de la surface libre qui s'obtient en faisant $J_1 = J_2 = 0$. Le cristal est alors coupé en deux. Soit $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_0 + V_S$ l'hamiltonien d'un cristal coupé.

Considérons maintenant deux cristaux semi-infinis différents en présence l'un de l'autre, possédant des surfaces libres identiques mais sans interaction et appelons $\mathcal{H}$ l'hamiltonien du système total.

Soit $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H} + V_1$ l'hamiltonien du système quand on couple les deux cristaux semi-infinis à l'aide d'interactions d'échange J'_1, J'_2 .

Définissons la fonction de Green

$$G_0(E) = [(E + i\epsilon) I - \mathcal{H}_0]^{-1}$$

et de façon identique les fonctions de Green G_D, G_S, G et G_1 faisant intervenir respectivement les

hamiltoniens $\mathcal{H}_D, \mathcal{H}_S, \mathcal{H}$ et $\mathcal{H}_1$. Dans ces expressions ϵ est un nombre infinitésimal positif.

Les fonctions de Green G_D et G_1 se déduisent respectivement de G_0 et G d'après les relations :

$$G_D = G_0(I - V_D G_0)^{-1} \quad (2)$$

$$G_1 = G(I - V_1 G)^{-1} \quad (2')$$

Les modes localisés à l'extérieur de la bande de volume ou résonants à l'intérieur de celle-ci se déduisent de

$$\text{Re} \det (I - V_D G_0) = 0 \quad \text{pour un défaut plan} \quad (3)$$

et

$$\text{Re} \det (I - V_1 G) = 0 \quad \text{pour une interface.} \quad (3')$$

Après le calcul des fonctions de Green appropriées nous pourrions étudier ces modes pour les interfaces (001) et (110).

3. **Etude des interfaces (001).** — Dans ce paragraphe nous appliquons le modèle précédent aux interfaces et défauts plans (001). Nous étudions comment les interactions d'échange à l'interface ou au défaut plan influent sur l'existence de modes localisés de magnons. Nous établissons également les lois de dispersion de ces modes dans certaines directions de haute symétrie de la zone de Brillouin à deux dimensions de l'interface. Des études analogues ont déjà été effectuées sur les phonons d'interface [8, 9]. Qualitativement plusieurs résultats de ces études sont identiques à ceux que nous trouvons ci-dessous.

Comme nous l'avons indiqué dans l'introduction, nous décrirons avec plus de détails le problème des défauts plans qui peut être traité analytiquement tout en contenant l'essentiel des résultats qualitatifs et nous étudierons plus sommairement les interfaces entre deux cristaux différents sur des exemples numériques.

Dans chaque cas nous commencerons par établir l'expression (3) dont les solutions fournissent les modes localisés.

3.1 DÉFAUT PLAN (001). — 3.1.1 *Calcul de $\det (I - V_D G_0)$. Modes localisés et résonnants.* — L'équation de mouvement de l'opérateur $b_l^\dagger$ pour un site $l = (l_x, l_y, l_z)$ situé au sein du cristal s'écrit :

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{b}_l^\dagger = & -2SJ_1 \left\{ 6b^\dagger(l_x, l_y, l_z) - \sum_{\sigma=\pm 1} [b^\dagger(l_x + \sigma, l_y, l_z) + b^\dagger(l_x, l_y + \sigma, l_z) + b^\dagger(l_x, l_y, l_z + \mu)] \right\} - \\ & -2SJ_2 \left\{ 12b^\dagger(l_x, l_y, l_z) - \sum_{\sigma, \mu=\pm 1} [b^\dagger(l_x + \sigma, l_y + \sigma, l_z) + b^\dagger(l_x + \sigma, l_y, l_z + \mu) + b^\dagger(l_x, l_y + \sigma, l_z + \mu)] \right\}. \quad (4) \end{aligned}$$

Une solution de la forme :

$$b_l^\dagger = b_k^\dagger e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l + \omega t)}$$

permet de déduire la loi de dispersion des magnons de volume

$$\frac{\omega}{2S} = 2J_1(3 - \cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_z a) + 4J_2(3 - \cos k_x a \cos k_y a - \cos k_y a \cos k_z a - \cos k_x a \cos k_z a). \quad (5)$$

Nous l'écrivons par la suite sous la forme

$$\omega = \Gamma - 2\beta \cos k_z a. \quad (5')$$

Pour k_x et k_y fixés, le bas et le haut de la bande de volume se trouvent respectivement en $\Gamma - 2\beta$ et $\Gamma + 2\beta$ si $\beta > 0$, en $\Gamma + 2\beta$ et $\Gamma - 2\beta$ si $\beta < 0$.

La loi (5) permet de calculer par transformation de Fourier dans la direction z la fonction de Green $G_0(k_x, k_y, l_z, l'_z, E)$:

$$G_0(k_x, k_y, l_z, l'_z, E) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\cos(l_z - l'_z) k_z a \, dk_z}{E - (\Gamma - 2\beta \cos k_z a) + i\varepsilon} = \frac{1}{\beta} \frac{t^{1+|l_z-l'_z|}}{t^2 - 1} \quad (6)$$

où

$$t = \begin{cases} s - \sqrt{s^2 - 1} & \text{si } s > 1 \\ s + i\sqrt{1 - s^2} & \text{si } -1 < s < 1 \\ s + \sqrt{s^2 - 1} & \text{si } s < -1 \end{cases} \quad (7)$$

avec

$$s = \frac{\Gamma - E}{2\beta}. \quad (8)$$

Créons maintenant un défaut plan en changeant les interactions d'échange de part et d'autre du plan $z = -a/2$, c'est-à-dire entre les plans $l_z = 0$ et $l_z = -1$, de J_1, J_2 en J'_1, J'_2 . La perturbation V_D introduite se déduit des équations de mouvement des atomes des plans $l_z = 0$ et $l_z = -1$ qui peuvent s'écrire de façon identique à (4). Après transformation de Fourier parallèlement au plan du défaut, cette perturbation s'écrit :

$$V_D(k_x, k_y, l_z, l'_z) = (\alpha' - \alpha)(\delta_{l_z,0} \delta_{l'_z,0} + \delta_{l_z,-1} \delta_{l'_z,-1}) + (\beta - \beta')(\delta_{l_z,0} \delta_{l'_z,-1} + \delta_{l_z,-1} \delta_{l'_z,0}) \quad (9)$$

avec

$$\alpha = 2S(J_1 + 4J_2) \quad (10-1)$$

$$\beta = 2S[J_1 + 2J_2(\cos k_x a + \cos k_y a)] \quad (10-2)$$

$$\alpha' = 2S(J'_1 + 4J'_2) \quad (10-3)$$

$$\beta' = 2S[J'_1 + 2J'_2(\cos k_x a + \cos k_y a)]. \quad (10-4)$$

Nous déduisons finalement $\det(I - V_D G_0)$ à partir de (6) et (9) :

$$\det(I - V_D G_0) = \frac{[(\alpha - \alpha' + \beta')t - \beta][(\alpha - \alpha' - \beta')t - \beta]}{\beta^2(1 - t^2)}. \quad (11)$$

Nous obtenons les modes localisés à l'extérieur de la bande de volume à partir des solutions de l'éq. (3) soit :

$$t_+ = \frac{\beta}{\alpha - \alpha' + \beta'} \quad (12)$$

$$t_- = \frac{\beta}{\alpha - \alpha' - \beta'}. \quad (12')$$

Ces solutions correspondent effectivement à des modes localisés lorsque

$$|t| < 1 \quad (13)$$

Dans ce cas les énergies de ces modes se déduisent de (8) en remarquant d'après (7) que :

$$s = \frac{1}{2} \left(t + \frac{1}{t} \right). \quad (14)$$

Enfin, pour les modes résonnants à l'intérieur de la bande de volume l'éq. (3) fournit les solutions $s = \pm 1$ c'est-à-dire le bas et le haut de la bande de volume.

3.1.2. Modes localisés de surface. — Nous appliquons d'abord les résultats précédents au cas d'une surface libre en faisant $J'_1 = J'_2 = 0$. Nous obtenons

alors d'après (12) une solution doublement dégénérée en t :

$$t = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{J_1 + 2 J_2 (\cos k_x a + \cos k_y a)}{J_1 + 4 J_2}. \quad (12'')$$

La condition (13) est remplie, c'est-à-dire que nous avons effectivement un mode localisé lorsque $J_1 > 0$, $J_2 > 0$. La loi de dispersion de ce mode s'obtient à partir de (8) et (14) :

$$\begin{aligned} \omega_s = 8 S(J_1 + 4 J_2) \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} \right) - \\ - 32 S J_2 \sin^2 \frac{k_x a}{2} \sin^2 \frac{k_y a}{2} - \frac{32 S J_2^2}{J_1 + 4 J_2} \\ \times \left(\sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} \right)^2. \end{aligned}$$

Ces résultats ont déjà été établis par Wallis *et al.* [1] en cherchant une solution des équations de mouvement des opérateurs $b_l^\dagger$ sous la forme d'une onde oscillatoire dans le plan de la surface et exponentiellement amortie vers l'intérieur du cristal.

3.1.3. Discussion des modes localisés à un défaut plan. — Nous allons discuter dans ce paragraphe de l'influence des interactions d'échange J'_1 , J'_2 à travers le défaut sur la condition (13) d'existence de modes localisés.

Pour ce faire, nous supposons que les interactions d'échange entre 1^{er} et 2^e voisins sont réduites de la

FIG. 2. — Représentation schématique de l'évolution des modes localisés à un défaut plan (001) en fonction de $\varepsilon = J'_1/J_1 = J'_2/J_2$.
a) $0 < K < 1$. b) $1 < K < 2$. c) $K < 0$.

même façon au défaut par rapport à leur valeurs en volume c'est-à-dire :

$$\frac{J'_1}{J_1} = \frac{J'_2}{J_2} = \varepsilon. \quad (15)$$

Pour bien distinguer l'influence de J'_1 et celle de J'_2 sur l'existence de modes localisés, nous étudierons à l'appendice le cas où seule l'interaction entre premiers voisins J'_1 subsiste à travers le défaut c'est-à-dire $J'_2 = 0$. Introduisons les deux paramètres

$$\gamma = \frac{J_1}{J_2} \quad (16)$$

et

$$K = \frac{2(2 - \cos k_x a - \cos k_y a)}{\gamma + 4}. \quad (17)$$

(Remarquons que dans la région ferromagnétique du plan (J_1, J_2) d'un cristal cubique simple c'est-à-dire $J_1 > 0$, $J_1 + 4J_2 > 0$, nous avons toujours $K < 2$.)

Les solutions (12) en t se mettent sous la forme :

$$t_+ = \frac{1 - K}{1 - \varepsilon K}, \quad t_- = \frac{1 - K}{1 - \varepsilon(2 - K)}.$$

Ainsi t_+ et t_- dépendent de J_1, J_2, k_x et k_y à travers le seul paramètre K . Par contre leur dépendance en J'_1, J'_2 fait intervenir le paramètre ε .

Étudions d'abord la variation des états localisés en fonction de paramètre de couplage ε au défaut, K étant fixé.

Nous avons représenté schématiquement le résultat sur les figures (2) où nous avons distingué les trois cas suivants :

(i) $0 < K < 1$. — Ceci correspond à $J_2 > 0$ et $\beta > 0$ (voir la définition de β en (10-2)).

Pour $\varepsilon = 0$, nous obtenons l'état localisé en surface, doublement dégénéré. Lorsque ε croît à partir de 0, l'état dégénéré se sépare en deux états d'énergie croissante, ce qui est physiquement raisonnable.

A $\varepsilon = \frac{K}{2 - K}$ celui provenant de t_- atteint le bas de la bande de volume et à partir de ce moment se mélange avec les états de volume. Il redevient localisé près du défaut au-dessus de la bande de volume pour $K > 1$. De même le mode localisé provenant de t_+ disparaît dans la bande de volume pour

$$1 \leq \varepsilon \leq \frac{2 - K}{K}.$$

Ainsi selon la valeur de ε il peut exister un ou deux modes localisés près du défaut plan.

(ii) $1 < K < 2$. — Ceci correspond à $J_2 > 0$ et $\beta < 0$.

Qualitativement nous avons le même résultat que dans le cas précédent. L'état provenant de t_+ disparaît ici pour $\frac{2 - K}{K} \leq \varepsilon \leq 1$, celui provenant de t_- pour $1 \leq \varepsilon \leq \frac{K}{2 - K}$.

(iii) $K < 0$. — Ceci correspond à $J_2 < 0$ et (automatiquement) $\beta > 0$. Maintenant il apparaît deux états localisés pour $\varepsilon > 1$ c'est-à-dire lorsque le couplage à travers le défaut est relativement fort et aucun pour $\varepsilon < 1$. Remarquons que pour $J_2 < 0$ il n'existait précisément pas d'état de surface.

L'énergie de l'état — est croissante en fonction

FIG. 3. — Evolution des modes localisés à un défaut plan (001) dans les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin à deux dimensions. Les paramètres utilisés sont $J_1 = 2J_2$, $\varepsilon = \frac{1}{2}$. La zone de Brillouin est dessinée à l'intérieur de la figure. S désigne l'état de surface, I_1 et I_2 ceux d'interface. Les modes résonnants résultant de la description du paragraphe 3.2.3 du défaut plan sont tracés en pointillés.

FIG. 4. — Représentation en fonction de $\gamma = J_1/J_2$ et de $\cos k_x a + \cos k_y a$ des domaines où existe un seul mode localisé à un défaut plan (001) (domaines I) et celui où il en existe deux (domaine II). Lorsque $\varepsilon < 1$ les points M et M' ont respectivement pour ordonnées : $2(1 - \varepsilon)/(1 + \varepsilon)$ et $-2(1 - \varepsilon)/(1 + \varepsilon)$, les points N et N' ont respectivement pour abscisses 4ε et $4/\varepsilon$. Lorsque $\varepsilon > 1$ il faut interchanger les ordonnées de M et M' ainsi que les abscisses de N et N'.

de ε , celle de l'état +, décroissante. L'énergie de l'état + devient négative au-delà d'une certaine valeur de ε . Ceci s'explique par le fait que dans le modèle présent J'_2 est négatif et proportionnel à ε . Son effet, tendant à rendre instable l'état ferromagnétique, devient donc de plus en plus important lorsque ε croît. Remarquons que ce fait ne se présente pas dans le cas traité à l'appendice où nous supposons $J'_2 = 0$.

Reprenons le cas $J_2 > 0$ ($K > 0$) : nous avons vu (Fig. 2) que pour une valeur fixée de ε il existe au moins un état localisé, un second état existant pour certaines valeurs de K donc aussi de k_x, k_y . Ainsi par exemple la figure 3 montre la courbe de dispersion des magnons localisés dans les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin pour $J_1 = 2J_2$ et $\varepsilon = \frac{1}{2}$. Un premier état I_1 existe partout alors qu'un second I_2 n'apparaît qu'entre le point M et le milieu de l'axe Σ .

De façon générale, pour ε et γ fixés, la condition (13) permet de déterminer la région de la zone de Brillouin où il existe deux modes localisés et celle où il en existe un seul. Après quelques calculs nous obtenons la condition pour avoir deux tels modes.

$$\begin{aligned} \frac{-2 - \gamma + 2\varepsilon}{1 + \varepsilon} &< \cos k_x a + \cos k_y a \\ &< \frac{2 - 2\varepsilon - \varepsilon\gamma}{1 + \varepsilon} \quad \text{quand } \varepsilon < 1 \\ \frac{2 - 2\varepsilon - \varepsilon\gamma}{1 + \varepsilon} &< \cos k_x a + \cos k_y a \\ &< \frac{-2 - \gamma + 2\varepsilon}{1 + \varepsilon} \quad \text{quand } \varepsilon > 1. \end{aligned}$$

Nous avons représenté (Fig. (4)) en fonction de γ et de $(\cos k_x a + \cos k_y a)$ les domaines où existe un seul mode localisé (domaine I de la figure) et celui où il en existe deux (domaine II).

En particulier, cette figure montre qu'à la limite des grandes longueurs d'onde $k_x, k_y \gtrsim 0$ (ce qui entraîne $\cos k_x a + \cos k_y a \lesssim 2$) nous obtenons toujours un seul magnon localisé. D'autre part si $\gamma > \sup(4\varepsilon, 4/\varepsilon)$ il existe un seul état localisé dans toute la zone de Brillouin.

Nous n'avons considéré dans ce travail que le modèle simple de défauts plans (001) dans un cristal cubique simple, cependant d'autres modèles plus réalistes peuvent être traités, par exemple celui d'une faute d'empilement dans un cristal C.F.C. Dans ce cas, le nombre de premiers et seconds voisins de tout atome du cristal reste inchangé, par contre un atome près du défaut voit un arrangement géométrique des atomes de son voisinage qui est différent de celui vu par un atome en volume. Nous avons montré dans ce modèle que lorsque $\varepsilon = 1$ aucun mode localisé ne peut apparaître sur le défaut; ce résultat est identique à celui du modèle de cristal cubique simple.

De façon générale, l'étude précédente montre que lorsque ε est voisin de l'unité, les modes localisés ont une énergie voisine de la bande de volume. Ceci est vraisemblablement le cas pour une faute d'empilement. Cependant pour un joint de grain les interactions au défaut peuvent être différentes de celles en volume ⁽¹⁾.

3.2 INTERFACES (001) ENTRE DEUX CRISTAUX DIFFÉRENTS. — L'étude précédente du défaut plan fournit une idée qualitative de l'évolution des modes localisés avec le couplage à l'interface ou dans une direction de haute symétrie de la zone de Brillouin. Nous allons étendre cette étude au cas des interfaces de deux cristaux différents. Les solutions de (3') ne peuvent plus être trouvées analytiquement et nous serons amenés à étudier des cas particuliers numériquement. Nous retrouverons ainsi certaines caractéristiques principales de l'étude du défaut plan.

3.2.1 Calcul de dét ($I - V_1 G$). — Pour calculer l'expression de dét ($I - V_1 G$) nous devons connaître d'une part la fonction de Green G décrivant deux cristaux semi-infinis A et B avec des surfaces identiques, d'autre part la perturbation V_1 couplant ces deux cristaux à l'aide d'interactions d'échange J'_1, J'_2 .

Supposons que les cristaux A et B occupent respectivement les demi-espaces $l_z \geq 0$ et $l_z < 0$.

La fonction de Green G peut s'écrire à l'aide des fonctions de Green G_S^A et G_S^B des deux cristaux semi-infinis terminés par une surface libre sous la forme :

$$G(k_x, k_y, l_z, l'_z, E) = \begin{cases} G_S^A(k_x, k_y, l_z, l'_z, E) & \text{si } l_z, l'_z \geq 0 \\ G_S^B(k_x, k_y, l_z, l'_z, E) & \text{si } l_z, l'_z < 0 \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (18)$$

⁽¹⁾ Note : Une fois ce travail terminé, l'article de Harriague et al. [13] a été porté à notre attention. Ils étudient les magnons localisés près d'une faute d'empilement d'un cristal ferromagnétique C.F.C. Leurs résultats sont qualitativement les mêmes que ceux

donnés dans cette partie de notre article, bien que leur modèle de défaut plan diffère du nôtre. Cependant ils n'ont comme nous des magnons localisés près d'un défaut plan qu'en changeant la valeur des intégrales d'échange près du défaut plan.

Or la fonction de Green G_S se déduit aisément de sa définition (2) en utilisant l'expression (9) de V_S :

$$G_S(k_x, k_y, l_z, l'_z, E) = \begin{cases} \frac{1}{\beta(t^2 - 1)} \left[t^{1+|l_z-l'_z|} + \frac{t^{l_z+l'_z+2}(\beta t - \alpha)}{\alpha t - \beta} \right] & \text{si } l_z, l'_z \geq 0 \\ \frac{1}{\beta(t^2 - 1)} \left[t^{1+|l_z-l'_z|} + \frac{t^{l_z+l'_z}(\beta t - \alpha)}{\alpha t - \beta} \right] & \text{si } l_z, l'_z < 0 \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases}$$

Enfin la perturbation V_I s'écrit de façon analogue à (9)

$$V_I(k_x, k_y, l_z, l'_z) = \alpha'(\delta_{l_z,0} \delta_{l'_z,0} + \delta_{l_z,-1} \delta_{l'_z,-1}) - \beta'(\delta_{l_z,0} S_{l'_z,-1} + \delta_{l_z,-1} \delta_{l'_z,0}). \quad (19)$$

Nous déduisons à partir de (18) et (19) :

$$\det(I - V_I G) = \left(1 - \frac{\alpha' t_A}{\alpha_A t_A - \beta_A}\right) \left(1 - \frac{\alpha' t_B}{\alpha_B t_B - \beta_B}\right) - \frac{\beta'^2 t_A t_B}{(\alpha_A t_A - \beta_A)(\alpha_B t_B - \beta_B)}. \quad (20)$$

3.2.2 Application. — Il n'existe pas de solution analytique de l'équation (3') pour l'expression (20) de $\det(I - V_I G)$. Nous allons donner ici les solutions de cette équation dans le cas particulier où les interactions d'échange des deux cristaux A et B sont dans le même rapport, c'est-à-dire :

$$\frac{J_{1B}}{J_{2B}} = \frac{J_{1A}}{J_{2A}}$$

nous prendrons ce rapport égal à 2 et choisirons par ailleurs $J_{1A} = 2 J_{1B}$; nous supposons enfin :

$$\frac{J'_1}{J'_2} = \frac{J_{1A}}{J_{2A}}.$$

La figure 5 montre l'évolution des états localisés et résonnants en fonction du rapport J'_1/J_{1A} caractérisant le couplage à l'interface au point $k_x = \pi/a$, $k_y = 0$ de la zone de Brillouin. Pour $J'_1 = 0$ nous obtenons les modes localisés près des surfaces des deux cristaux semi-infinis. Lorsque J'_1 croît nous avons deux modes d'interface d'énergie croissante. Pour des valeurs plus grandes de J'_1 ces modes entrent en résonance avec les états de la bande de volume puis redeviennent localisés avec une énergie supérieure à celle des bandes de volume.

La figure 6 montre l'évolution des états localisés et résonnants sur l'axe $k_y = 0$ de la zone de Brillouin ($0 \leq k_x < \pi/a$) pour différentes valeurs du rapport J'_1/J_{1A} .

Les états sont localisés en bas ou en haut des deux bandes ou encore à l'intérieur de *gap* entre celles-ci; ils sont résonnants à l'intérieur de l'une ou des deux bandes. Pour chaque valeur de J'_1/J_{1A} il existe deux courbes de dispersion, d'énergie croissante avec J'_1/J_{1A} .

Plusieurs cas peuvent être distingués selon le comportement des courbes à la limite des grandes longueurs d'ondes. En effet si $J'_1/J_{1A} < 2/3$ les

FIG. 5. — Evolution des modes localisés et résonnants à une interface (001) au point ($k_x = \pi/a$, $k_y = 0$) de la zone de Brillouin en fonction du rapport J'_1/J_{1A} . Les paramètres utilisés sont $J_{1A}/J_{2A} = J_{1B}/J_{2B} = 2$, $J_{1A}/J_{1B} = 2$.

énergies des deux modes tendent vers zéro lorsque $k_x, k_y \rightarrow 0$; si

$$\frac{2}{3} \leq \frac{J'_1}{J_{1A}} \leq \frac{6 + 2\sqrt{2}}{7},$$

l'énergie de l'un des modes tend vers zéro tandis que celle de l'autre tend vers une valeur finie située à

FIG. 6. — Evolution des modes localisés et résonnants à une interface (001) selon l'axe $k_y = 0$ de la zone de Brillouin, pour différentes valeurs de $\varepsilon = J'_1/J_{1A}$. Les paramètres utilisés sont : $J_{1A}/J_{2A} = J_{1B}/J_{2B} = 2$, $J_{1A}/J_{1B} = 2$.

l'intérieur de la bande du cristal A et au-dessus de celle du cristal B ; enfin pour

$$\frac{J'_1}{J_{1A}} > \frac{6 + 2\sqrt{2}}{7}$$

la limite aux grandes longueurs d'ondes de l'énergie de ce dernier mode est située au-dessus des bandes des deux cristaux.

Il est intéressant de noter que lorsque l'énergie d'un état est intérieur à la fois aux deux bandes, l'onde correspondante peut se propager dans les deux cristaux ; celle-ci est partiellement réfléchiée et partiellement transmise à l'interface. Par contre, lorsque cette énergie est à l'intérieur de la bande du premier cristal et à l'extérieur de celle du second, l'onde se propage uniquement dans le premier cristal et subit une réflexion totale à l'interface.

3.2.3 Remarque sur le cas particulier d'un défaut plan. — Nous pouvons décrire un défaut plan comme un cas particulier d'une interface entre deux cristaux différents en faisant dans l'expression (20) :

$$J_{1A} = J_{1B}, \quad J_{2A} = J_{2B}.$$

L'éq. (3') permet alors de retrouver les modes localisés au défaut plan que nous avons décrits au paragraphe 3.1.

Cependant il convient de préciser que la description actuelle et celle du paragraphe 3.1 sont relatives à des phénomènes différents si l'on s'intéresse au calcul des grandeurs thermodynamiques ou à celui des états résonnants. En effet dans la description actuelle nous introduisons une perturbation V_1 par rapport à l'hamiltonien $\mathcal{H}$ faisant passer du cristal coupé au cristal présentant un défaut plan alors que dans la

description du paragraphe 3.1 la perturbation est V_D par rapport à l'hamiltonien $\mathcal{H}_0$ faisant passer du cristal infini au cristal avec le défaut plan.

Remarquons que $\mathcal{H} + V_1 = \mathcal{H}_0 + V_D$.

Plus précisément, dans les deux descriptions nous avons une définition différente du déphasage $\eta(\eta_D = -\text{Arg} \det(I - V_D G_0))$ au paragraphe 3.1 et $\eta_1 = -\text{Arg} \det(I - V_1 G)$ ici avec $\eta_D = \eta_s + \eta_1$ où $\eta_s = -\text{Arg} \det(I - V_s G_0)$ lequel fournit la variation de la densité d'états dans le passage du problème non perturbé à celui perturbé

$$\Delta n(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\eta(E)}{dE}$$

et dont le passage par $\pm \pi/2$ correspond à un mode résonnant.

Sur la figure 3 nous avons représenté les modes résonnants à un défaut plan résultant de la description actuelle.

4. Etude des interfaces (110). — Lorsqu'un magnon localisé de fréquence négative peut exister à l'interface entre deux cristaux, l'instabilité de ce mode conduit à la formation d'une surstructure magnétique à cette interface. Pour montrer la possibilité d'existence d'une telle instabilité, nous appliquons le formalisme du paragraphe 2 aux interfaces (110). En effet [6], pour cette orientation cristallographique, une surface libre présente une surstructure pour certaines valeurs des interactions d'échange J_1, J_2 . Dans le cas des interfaces, nous étudions également l'effet du couplage à l'interface sur l'existence d'une instabilité.

De façon analogue, une surstructure dans la position des atomes peut apparaître à une interface lorsqu'un phonon localisé à cette interface devient *mou*. Une telle surstructure a été mise en évidence sur une surface (001) d'un cristal cubique simple [11, 12]. Le problème peut ici encore être étendu au cas des interfaces.

Soit l un nombre entier désignant la position des plans atomiques à partir de l'interface parallèlement à la direction (110).

Nous supposons que les deux cristaux semi-infinis occupent respectivement les demi-espaces $l \geq 0$ et $l < 0$.

Effectuons une transformation de Fourier de l'équation du mouvement (4) parallèlement à la direction (110) en considérant une solution du type :

$$b^\dagger(\mathbf{R}_l) = b^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_l}$$

où

$$\mathbf{k}_\parallel = k_z \mathbf{z} + k_y \mathbf{Y}$$

et

$$\mathbf{Y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

Nous obtenons :

$$i\dot{b}^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) = -2SJ_1 \left[(6 - 2\cos k_z a) b^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) - 2\cos \frac{k_y a}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma=\pm 1} b^\dagger(l + \sigma, \mathbf{k}_\parallel) \right] - \\ - 2SJ_2 \left[(12 - 2\cos k_y a \sqrt{2}) b^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) - 4\cos \frac{k_y a}{\sqrt{2}} \cos k_z a \sum_{\sigma=\pm 1} b^\dagger(l + \sigma, \mathbf{k}_\parallel) - \sum_{\sigma=\pm 2} b^\dagger(l + \sigma, \mathbf{k}_\parallel) \right]. \quad (21)$$

Nous choisissons pour tout ce qui suit $k_y = \pi/a \sqrt{2}$. L'éq. (21) devient alors :

$$i\dot{b}^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) = -2SJ_1 [(b - 2\cos k_z a) b^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel)] - 2SJ_2 \left[14 b^\dagger(l, \mathbf{k}_\parallel) - \sum_{\sigma=\pm 2} b^\dagger(l + \sigma, \mathbf{k}_\parallel) \right]. \quad (22)$$

Il y a donc découplage entre les équations de mouvement des plans de l pairs et ceux de l impairs. Le problème pourra donc être traité séparément pour chaque type de plan.

Nous allons traiter d'abord le cas des défauts plans, ensuite celui des interfaces entre deux cristaux différents.

4.1 DÉFAUTS PLANS (110). — 4.1.1 Calcul de $\det(I - V_D G_0)$. *Remarques générales.* — La fonction de Green G_0 du cristal infini se déduit de (22) de la même manière qu'au paragraphe 3 :

$$G_0(k_z, k_y, l, l', E) = \begin{cases} \frac{1}{J_2} \frac{t^{1+\frac{|l-l'|}{2}}}{t^2 - 1} & \text{si } |l - l'| \text{ est pair} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (23)$$

avec la même définition de t qu'en (7) et :

$$s = \frac{(6 - 2\cos k_z a) J_1 + 14 J_2 - \frac{E}{2S}}{2 J_2}. \quad (24)$$

La perturbation V_D introduite lors de la création du défaut s'obtient à partir des équations du mouvement des plans $l = -2, -1, 0, 1$; elle se sépare en deux parties relatives aux plans de l pairs et impairs respectivement :

$$V_D(k_z, k_y, l, l') = V_D^P + V_D^I \quad (25) \\ V_D^P = a(\delta_{l,-2} \delta_{l',-2} - \delta_{l,0} \delta_{l',-2} - \delta_{l,-2} \delta_{l',0}) + b\delta_{l,0} \delta_{l',0} \\ V_D^I = a(\delta_{l,1} \delta_{l',1} - \delta_{l,1} \delta_{l',-1} - \delta_{l,-1} \delta_{l',1}) + b\delta_{l,-1} \delta_{l',-1}$$

où les indices P et I désignent respectivement pair et impair ;

$$a = J'_2 - J_2 \\ b = 2(J'_1 - J_1) + 5(J'_2 - J_2).$$

D'après (23) et (25) nous déduisons :

$$\det(I - V_D G_0) = [\det(I - V_D G_0)]_P [\det(I - V_D G_0)]_I \quad (26)$$

avec

$$[\det(I - V_D G_0)]_P = [\det(I - V_D G_0)]_I = \frac{t^2[(a + J_2)^2 - ab] - t(a + b)J_2 - J_2^2}{J_2^2(t^2 - 1)}. \quad (27)$$

Les solutions de l'éq. (3) seront donc doublement dégénérées dans le cas des défauts plans (110).

Nous allons montrer, à ce stade, qu'il suffit de se limiter au point $k_z = 0$ pour mettre en évidence une instabilité. Dans ce but, nous allons établir les deux points suivants : d'une part la condition d'existence

d'un mode localisé ne dépend pas de k_z ($0 \leq k_z < \pi/a$), d'autre part l'énergie d'un tel mode est croissante quand k_z varie de 0 à π/a ; autrement dit si les modes localisés correspondant à $k_z = 0$ sont stables, les modes localisés correspondant à des valeurs différentes de k_z le sont aussi.

Le premier point résulte du fait que dans l'expression (26) de $\det(I - V_D G_0)$ aucun coefficient ne dépend de k_z ; par conséquent, les solutions en t de l'éq. (3) ainsi que la condition (13) d'existence d'un mode localisé sont également indépendants de k_z .

Cependant l'énergie d'un tel mode qui se déduit à partir des expressions (14) et (24) dépend de k_z . L'expression (24) montre précisément que cette énergie croît quand k_z varie de 0 à π/a d'où le second point de notre démonstration.

En conclusion, nous nous plaçons dans toute la suite au point ($k_y = \pi/a \sqrt{2}$, $k_z = 0$) de la zone de Brillouin.

4.1.2 *Stabilité d'une surface* (110). — Pour appliquer les résultats précédents à une surface (110) faisons $J'_1 = J'_2 = 0$ dans (26). L'éq. (3) admet alors la solution

$$t = \frac{J_2}{2J_1 + 5J_2}$$

qui vérifie la condition (13), c'est-à-dire correspond effectivement à un mode localisé, dans toute la région ferromagnétique du plan (J_1, J_2) d'un cristal cubique simple.

Remarquons la différence avec le résultat pour la

surface (001) où le mode localisé existait uniquement lorsque $J_2 > 0$.

La fréquence du mode localisé s'obtient d'après (14) et (24) :

$$\omega = \frac{8S(J_1^2 + 7J_1J_2 + 11J_2^2)}{2J_1 + 5J_2}.$$

La région du plan (J_1, J_2) où apparaît une instabilité ($\omega < 0$) est représentée sur la figure 7; elle est limitée par les droites

$$J_1 + 4J_2 = 0 \quad \text{et} \quad J_1 + \left(\frac{7 + \sqrt{5}}{2}\right)J_2 = 0.$$

Nous trouvons le résultat de Blandin *et al.* [6] qui est d'ailleurs qualitativement identique à celui donné d'abord par Blandin [3] par la face (11) d'un réseau carré de spins.

4.1.3 *Stabilité d'un défaut plan* (110). — Pour étudier l'influence des interactions d'échange J'_1, J'_2 à travers le défaut sur l'apparition d'une instabilité, nous nous plaçons dans l'hypothèse (15) où ces interactions sont réduites de la même façon par rapport à leurs valeurs en volume.

Nous étudierons dans l'appendice le même problème lorsque $J'_2 = 0$.

L'éq. (3) conduit alors aux solutions :

$$\frac{1}{t_{\pm}} = \frac{(J_1 + 3J_2)(1 - \varepsilon) \pm \sqrt{(J_1 + 2J_2)^2(1 - \varepsilon)^2 + J_2^2\varepsilon^2}}{J_2} \quad (28)$$

qui admettent d'après (14) et (24) comme pulsations :

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{\pm}}{2S} = & 4J_1 + 14J_2 + (J_1 + 3J_2)(\varepsilon - 1) \mp \sqrt{(J_1 + 2J_2)^2(1 - \varepsilon)^2 + J_2^2\varepsilon^2} + \\ & + \frac{J_2^2}{(J_1 + 3J_2)(\varepsilon - 1) \mp \sqrt{(J_1 + 2J_2)^2(1 - \varepsilon)^2 + J_2^2\varepsilon^2}}. \end{aligned} \quad (29)$$

A partir de là on peut trouver en fonction de ε la région du plan (J_1, J_2) où la condition (13) est vérifiée par l'expression (28) de $t_{\pm}$. Les résultats sont donnés dans le tableau I : nous en déduisons qu'il existe toujours un ou deux modes localisés en ce point de haute symétrie de la zone de Brillouin

$$\left(k_y = \frac{\pi}{a\sqrt{2}}, \quad k_z = 0\right).$$

Nous nous intéressons plus particulièrement au problème de la stabilité magnétique du défaut plan, c'est-à-dire au signe des fréquences $\omega_{\pm}$ des modes localisés.

Il est facile de montrer que la fréquence ω_- est toujours positive quand elle correspond effectivement

à un mode localisé; par contre ω_+ peut devenir négative selon les valeurs de ε et du rapport J_2/J_1 . La figure 8 précise la région d'instabilité du plan (J_1, J_2) en fonction de ε : celle-ci se rétrécit lorsque ε croît à partir de 0 (surface libre) pour disparaître complètement à $\varepsilon = 1$ (cristal infini sans défaut), puis

TABLEAU I

ε	0	1	$2 + \frac{2J_2}{J_1 + 2J_2}$	$+\infty$
$ t_+ < 1$	oui	non		oui
$ t_- < 1$	non	oui		oui

FIG. 7. — Instabilité d'une surface (110). Les domaines de stabilité ferromagnétique et antiferromagnétique d'un cristal cubique simple dans le plan (J_1, J_2) sont indiqués respectivement par F. et A.F. La surface (110) d'un ferromagnétique présente une instabilité dans la région hachurée.

réapparaît et s'élargit de plus en plus lorsque ε croît au-delà de 1.

FIG. 8. — Instabilité d'une interface (110) en fonction de $\varepsilon = J_1/\sqrt{J_{1A} J_{1B}}$ pour différentes valeurs de $\eta = J_{1B}/J_{1A} = J_{2B}/J_{2A}$. Le domaine d'instabilité correspond à celui en dessous de la courbe, le domaine de stabilité à celui en dessus. Le cas $\eta = 1$ décrit un défaut plan.

4.2 INTERFACES (110) ENTRE DEUX CRISTAUX DIFFÉRENTS. — 4.2.1 Calcul de dét ($I - V_1 G$). — De façon analogue au paragraphe 3.2.1, la fonction de Green G des deux cristaux semi-infinis sans interaction s'écrit en fonction des fonctions de Green G_S^A et G_S^B des deux cristaux sous la forme :

$$G(k_z, k_y, l, l', E) = \begin{cases} G_S^A(k_z, k_y, l, l', E) & \text{si } l, l' \geq 0 \\ G_S^B(k_z, k_y, l, l', E) & \text{si } l, l' < 0 \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases} \quad (30)$$

La fonction de Green G_S se déduit de sa définition (2) en utilisant l'expression (25) de V_S :

$$G_S(k_z, k_y, l, l', E) = \begin{cases} G_S^P(l, l') & \text{si } l \text{ et } l' \text{ sont pairs} \\ G_S^I(l, l') & \text{si } l \text{ et } l' \text{ sont impairs} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (31)$$

avec

$$G_S^P(l, l') = \begin{cases} \frac{1}{J_2(t^2 - 1)} \left[t^{1+\frac{|l-l'|}{2}} + \frac{t^{2+\frac{l+l'}{2}}(J_2 t - 2J_1 - 5J_2)}{(2J_1 + 5J_2)t - J_2} \right] & \text{si } l, l' \geq 0 \\ \frac{1}{J_2(t^2 - 1)} [t^{1+\frac{|l-l'|}{2}} + t^{-\frac{l+l'}{2}}] & \text{si } l, l' < 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et :

$$G_S^I(l, l') = \begin{cases} \frac{1}{J_2(t^2 - 1)} [t^{1+\frac{|l-l'|}{2}} + t^{1+\frac{l+l'}{2}}] & \text{si } l, l' \geq 1 \\ \frac{1}{J_2(t^2 - 1)} \left[t^{1+\frac{|l-l'|}{2}} + \frac{t^{1-\frac{l+l'}{2}}(J_2 t - 2J_1 - 5J_2)}{(2J_1 + 5J_2)t - J_2} \right] & \text{si } l, l' \leq -1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Enfin la perturbation V_I peut s'écrire :

$$V_I(k_z, k_Y, l, l') = V_I^P(l, l') + V_I^I(l, l') \quad (32)$$

où

$$\begin{aligned} V_I^P(l, l') &= J_2'(\delta_{l,-2} \delta_{l',-2} - \delta_{l,0} \delta_{l',-2} - \delta_{l,-2} \delta_{l',0}) + (2J_1' + 5J_2') \delta_{l,0} \delta_{l',0} \\ V_I^I(l, l') &= J_2'(\delta_{l,1} \delta_{l',1} - \delta_{l,1} \delta_{l',-1} - \delta_{l,-1} \delta_{l',1}) + (2J_1' + 5J_2') \delta_{l,-1} \delta_{l',-1} . \end{aligned}$$

Nous déduisons d'après (30) et (32) :

$$\det(I - V_I G) = [\det(I - V_I G)]_P [\det(I - V_I G)]_I$$

avec

$$\begin{aligned} [\det(I - V_I G)]_P &= \frac{[(J_{2B} - J_2') t_B - J_{2B}] [(2J_{1A} + 5J_{2A} - 2J_1' - 5J_2') t_A - J_{2A}] - J_2'^2 t_A t_B}{J_{2B}(t_B - 1) [(2J_{1A} + 5J_{2A}) t_A - 1]} \\ [\det(I - V_I G)]_I &= \frac{[(J_{2A} - J_2') t_A - J_{2A}] [(2J_{1B} + 5J_{2B} - 2J_1' - 5J_2') t_B - J_{2B}] - J_2'^2 t_A t_B}{J_{2A}(t_A - 1) [(2J_{1B} + 5J_{2B}) t_B - 1]} . \end{aligned}$$

4.2.2 *Application.* — Nous considérons encore l'interface entre deux cristaux dont les intégrales d'échange sont dans le même rapport :

$$\frac{J_{1A}}{J_{2A}} = \frac{J_{1B}}{J_{2B}} = \gamma$$

et nous posons $\frac{J_{1B}}{J_{1A}} = \eta$.

Nous supposons par ailleurs

$$\frac{J_1'}{J_2'} = \frac{J_{1A}}{J_{2A}} = \frac{J_{1B}}{J_{2B}}$$

et nous introduisons le paramètre

$$\varepsilon = \frac{J_i'}{\sqrt{J_{iA} J_{iB}}} \quad (i = 1, 2) .$$

Lorsqu'un magnon devient mou ($\omega = 0$), l'expression (24) donne :

$$S_A = S_B = 2\gamma + 7 .$$

L'éq. (3') devient alors :

$$\begin{aligned} &\left\{ [(1 - \varepsilon\eta) t - 1] \left[(2\gamma + 5) \left(1 - \frac{\varepsilon}{\eta} \right) t - 1 \right] - \varepsilon^2 t^2 \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \left[\left(1 - \frac{\varepsilon}{\eta} \right) t - 1 \right] [(2\gamma + 5)(1 - \varepsilon\eta) t - 1] - \varepsilon^2 t^2 \right\} = 0 \quad (33) \end{aligned}$$

avec

$$t = t_A = t_B = 2\gamma + 7 + \sqrt{(2\gamma + 7)^2 - 1} .$$

Pour η fixé, chacun des deux facteurs du premier membre de (33) est une expression du second degré en ε dont les racines peuvent par conséquent être aisément calculées. Nous remarquons également que chaque facteur se déduit de l'autre par la transformation $\eta \rightarrow 1/\eta$, ce qui reste encore vrai dans le passage des racines de l'une à l'autre.

Ces racines permettent de tracer en fonction de ε

la courbe séparant la région du plan (J_1, J_2) où l'interface est stable de celle où elle ne l'est pas. Cette courbe est portée sur la figure 8 pour différentes valeurs de η .

Lorsque ε croît à partir de zéro, la région d'instabilité diminue d'abord jusqu'à un certain minimum, ensuite elle va en s'élargissant à partir de ce minimum.

D'autre part, pour une valeur fixée de ε , la région

d'instabilité est d'autant plus large que les bandes de volume des deux cristaux en présence sont plus séparées l'une de l'autre.

5. Conclusion. — Dans la première partie de ce travail, nous avons étudié les magnons localisés à une interface (001) entre deux cristaux cubiques simples ferromagnétiques. Dans la seconde partie nous avons considéré les interfaces (110) de tels cristaux et montré la possibilité d'apparition d'une instabilité magnétique résultant de l'existence de modes *mous* de magnons localisés. Dans chaque cas nous avons déterminé le rôle des interactions d'échange J'_1, J'_2 à l'interface. Pour un certain domaine de ces paramètres, les modes de surface se transforment en modes d'interfaces; lorsque la fréquence d'un tel mode devient négative, il apparaît une instabilité conduisant à une surstructure magnétique.

De façon générale, comme il se doit, faire croître l'interaction J'_1 ($J'_1 > 0$) tend à augmenter l'énergie d'un mode localisé et favoriser la stabilité de l'interface. La même conclusion subsiste pour l'interaction J'_2 quand elle est positive, l'inverse est vrai quand J'_2 est négative, une instabilité pouvant alors apparaître à l'interface.

Nous avons utilisé dans toute cette étude un modèle simplifié aussi bien du point de vue géométrique que de celui des valeurs des interactions d'échange à l'interface. Ses résultats sont donc qualitatifs dans l'application aux interfaces réelles.

Enfin, il convient de remarquer que l'étude des excitations vibrationnelles ou électroniques (dans l'approximation des liaisons fortes) est mathématiquement semblable à celle des excitations magnétiques. Outre l'existence de trois polarisations possibles, le problème des phonons est formellement identique à celui des magnons. Par contre, pour les électrons une différence essentielle apparaît du fait que le problème doit être traité de façon self-consistante.

Appendice. — Dans cet appendice nous traitons le problème de défauts plans (001) et (110) dans le cas où seule l'interaction J'_1 entre premiers voisins subsiste à travers le défaut ($J'_2 = 0$).

1. DÉFAUT PLAN (001). — Avec les notations du paragraphe 3, nous avons :

$$\alpha' = \beta' = 2SJ_1$$

et les solutions (12) en t deviennent :

$$t_+ = \frac{\beta}{\alpha}$$

$$t_- = \frac{\beta}{\alpha - 2\alpha'}$$

La solution t_+ est identique à celle obtenue au paragraphe 3.1 pour une surface libre. Nous avons vu

qu'elle correspond à un mode localisé lorsque $J_2 > 0$ ($K > 0$ (voir la définition de K en (17))).

Posons $\varepsilon' = \frac{\alpha'}{\alpha} = \frac{J'_1}{J_1 + 4J_2}$ et étudions la solution t_- comme au paragraphe 3.1.

Si $K < 0$ cette solution donne lieu à un mode localisé pour $\varepsilon' > 1 - K/2$. L'énergie de ce mode, part en $\varepsilon' = 1 - K/2$ du haut de la bande de volume du cristal infini, puis croît avec ε' .

Si $0 < K < 1$ (resp. $1 < K < 2$), nous obtenons à $\varepsilon' = 0$ l'état de surface qui voit son énergie croître lorsque ε' croît à partir de 0. A

$$\varepsilon' = \frac{K}{2} \left(\text{resp. } \varepsilon' = 1 - \frac{K}{2} \right)$$

cet état atteint le bas de la bande de volume et se mélange à partir de ce moment avec les états de la bande de volume. Il redevient localisé près du défaut au-dessus de la bande de volume à partir de

$$\varepsilon' = 1 - \frac{K}{2} \left(\text{resp. } \varepsilon' = \frac{K}{2} \right);$$

son énergie continue alors à croître avec ε' .

Le comportement de la solution t_- est donc dans tous les cas qualitativement identique à celui trouvé au paragraphe 3.1.

2. DÉFAUT PLAN (110). — De façon analogue au paragraphe 4.1, nous considérons la stabilité magnétique d'un défaut plan (110) au point

$$k_z = 0, \quad k_y = \frac{\pi}{a\sqrt{2}}$$

de la zone de Brillouin à deux dimensions.

FIG. 9. — Instabilité d'un défaut plan (110) dans le cas $J'_2 = 0$.

L'équation (3) admet alors la solution :

$$t = \frac{J_2}{2J_1 - 2J'_1 + 5J_2}$$

qui conduit à la fréquence

$$\frac{\omega}{2S} = \frac{4J_1^2 + 28J_1J_2 + 44J_2^2 - 4J_1'^2 - 8J_1'J_2}{2J_1 - 2J'_1 + 5J_2}.$$

Nous avons représenté sur la figure 9 le domaine du plan (J_1, J_2) où ce mode est localisé ($|t| < 1$) et celui où il devient mou ($|t| < 1$ et $\omega < 0$).

Il est intéressant de remarquer que dans le cas présent ($J'_2 = 0$), outre le découplage entre les équations du mouvement des plans de l pairs et ceux de l impairs, il se produit un découplage entre les équations du mouvement des plans appartenant respectivement aux deux cristaux semi-infinis.

Bibliographie

- [1] WALLIS, R. F., MARADUDIN, A. A., IPATOVA, I. P., KLOCHITKIN, A. A., *Solid State Commun.* **5** (1967) 89.
- [2] TRULLINGER, S. E., MILLS, D. L., *Solid State Commun.* **12** (1973) 819.
- [3] BLANDIN, A., *Solid State Commun.* **13** (1973) 1537.
- [4] SATTler, K., SIEGMANN, H. C., *Phys. Rev. Lett.* **29** (1972) 1565.
- [5] HERPIN, A., *Théorie du Magnétisme* (Presses Universitaires de France) 1968, 593.
- [6] BLANDIN, A., CASTIEL, D. (à paraître).
- [7] Voir par exemple LENGART, P., DOBRZYNSKI, L., LEMAN, G., *Annls de Phys.* **6** (1973) 407.
- [8] MASRI, P., DOBRZYNSKI, L., *Surf. Sci.* **34** (1973) 119.
- [9] MASRI, P., DOBRZYNSKI, L., *J. Physique* **36** (1975) 551.
- [10] HOLSTEIN, T., PRIMAKOFF, H., *Phys. Rev.* **58** (1940) 1098.
- [11] TRULLINGER, S. E., CUNNINGHAM, S. L., *Phys. Rev.* **B 8** (1973) 2622.
- [12] BLANDIN, A., CASTIEL, D., DOBRZYNSKI, L., *Solid State Commun.* **13** (1973) 1175.
- [13] HARRIAGUE, S., MAJLIS, N., *Int. J. Magn.* **6** (1974) 269.