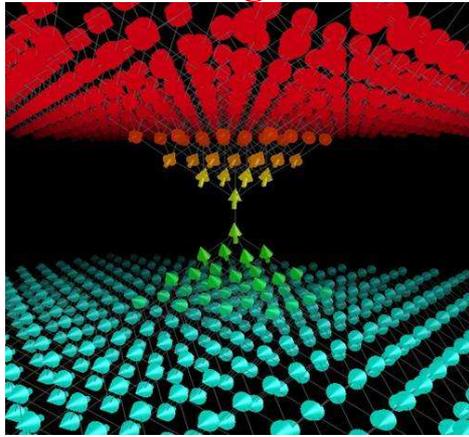


Réunion thématique du GDR-DFT++ Apport de la structure électronique au Nano-magnétisme



17-19 Octobre 2007, CEA Saclay, INSTN

La réunion « Nanomagnétisme » s'est déroulée au CEA Saclay (INSTN) du 17 au 19 octobre 2007 et a compté une quarantaine de participants et orateurs. Ce domaine de recherche connaît actuellement un développement rapide, poussé notamment par l'essor de la spintronique et de son potentiel d'applications technologiques : vanes de spin, mémoires magnétiques, têtes de lecture etc...La réunion a rassemblé des scientifiques d'horizons divers et les présentations ont été « classées » en différents domaines :

- Matériaux et magnétisme** (C.C. Fu)
- Rayonnement synchrotron et magnétisme** (R. Belkhou, O. Bezencenet)
- magnétisme des nano-objets** (Y. Nahas, V. Dupuis)
- micro-magnétisme** (A. Thiaville, T. Jourdan, J. Miltat, D. Ledue)
- magnétisme et corrélations électroniques** (M.B. Lepetit, M. Zbiri, G. Radtke, D. Stoeffler, C. Barreteau)
- spintronique** (M. Viret, A. Ramos, G. Autès, F. Piéchon)

Le format des exposés était d'une trentaine de minutes, plus 10 minutes consacrées aux questions. Afin de laisser le temps à la discussion (et pallier les éventuels débordements horaires) une pause de 40 minutes était prévue le matin et l'après midi, ainsi qu'une pause déjeuner de 1h30.

Le thème « Matériaux et magnétisme » n'était représenté que par un exposé (C.C., Fu) car il se situait un peu en marge du sujet de la réunion, mais il a permis de mettre en évidence un aspect jusqu'à présent négligé en métallurgie : le magnétisme et notamment son influence sur l'énergie des défauts à l'échelle atomique (lacune, interstitiels, joints de grains etc..).

Il nous a semblé important d'aborder l'outil expérimental essentiel pour caractériser le magnétisme notamment orbital à l'échelle atomique: le rayonnement synchrotron et plus particulièrement la microscopie X-PEEM. Cette session a été représentée par R. Belkhou qui a exposé les principes de base de la méthode et par O. Bezencenet qui a exposé ses résultats de thèse sur l'étude du couplage d'échange à l'interface $\text{Co}/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ où elle a utilisé le rayonnement synchrotron. La session magnétisme des nano-objets était au cœur du thème de cette réunion et a été illustrée par deux exposés présentant des résultats expérimentaux sur des nanoplots de Co déposés sur une surface de Au (Y. Nahas) et sur des agrégats bimétalliques CoPt (V. Dupuis). Ces travaux illustrent bien l'intérêt de la communauté pour les objets magnétiques de taille nanométrique présentant une forte anisotropie. En effet le couplage entre un élément magnétique (Co) et un élément non magnétique mais à fort couplage spin-orbite (Au, Pt) permet d'exacerber l'anisotropie, en particulier en basse dimension.

La session du jeudi matin sur le micro-magnétisme a permis de faire le point sur les approches micro-magnétique (modèle continu) et intermédiaire (Heisenberg). A. Thiaville a fait une présentation générale des méthodes de micro-magnétisme et de leurs applications aux nano-objets en mettant en évidence les limites de ces approches, notamment lorsque les variations du magnétisme se font sur de très petites distances (inférieures au nm), nécessitant ainsi l'utilisation de calculs de structure électronique. T. Jourdan a présenté des travaux basés sur un Hamiltonien de type Heisenberg et le développement d'un algorithme multi-échelle performant pour traiter des systèmes de grande taille et raccorder à des approches continues. J. Miltat a présenté une utilisation des méthodes de micro-magnétisme appliquées aux oscillateurs de Hopf nanométriques. Enfin cette session s'est close sur les travaux de D. Ledue sur l'étude théorique de l'anisotropie de nanoparticules par des modèles phénoménologiques de type Néel.

Le jeudi après midi concernait de près la communauté du GDR DFT++ et regroupait une série d'exposés sur des calculs de structure électronique au-delà de la DFT classique (corrélations, DFT+U, polarisation orbitale etc..) M.B. Lepetit a exposé une méthode de calcul d'intégrales d'échange magnétiques dans les systèmes fortement corrélés. M. Zbiri a présenté une étude expérimentale et théorique des modes vibrationnels dans des composés du type SrCrGaO et a souligné la nécessité d'utiliser des corrections de type GGA+U. G. Radtke a montré comment extraire des intégrales d'échange phénoménologiques pour modéliser le système à gap de spin SrCu₂(BO₃)₂ à l'aide d'un Hamiltonien de Heisenberg. D. Stoeffler a exposé ses résultats sur l'étude ab-initio des propriétés électroniques et magnétiques de doubles perovskites, montrant que seule la méthode GGA+U permet d'être en accord avec l'expérience. Enfin C. Barreteau a présenté l'étude à l'aide d'une méthode de liaisons fortes, de l'influence de la dépendance orbitale complète de la matrice des interactions de Coulomb dans un Hamiltonien de Hartree-Fock sur le magnétisme orbital montrant que les effets dits de polarisation orbitale sont amplifiés en basse dimension.

La réunion s'est terminée le vendredi par quatre exposés sur l'électronique de spin : deux exposés expérimentaux (M. Viret et A. Ramos) et deux exposés théoriques (G. Autès, F. Piéchon). M. Viret a fait une présentation générale sur l'électronique de spin à l'échelle nanométrique. Il a commencé par exposer les principes de base du courant polarisé en spin, et ensuite abordé le phénomène de résistance de paroi magnétique et transfert de spin. Il a terminé sur les résultats obtenus dans son groupe sur la magnéto-résistance dans les constriction de taille atomique. A. Ramos a présenté une partie de son travail de thèse sur le magnétisme de bi-couches épitaxiées à base de CoFe₂O₄, système utilisé pour la fabrication de filtres à spin. La caractérisation de ce système était aussi bien chimique (XPS, EELS) que structurale (RHEED, TEM) et magnétique (cycle d'hystérésis par VSM, Neutron..). G. Autès a également exposé une partie de son travail de thèse sur le calcul de transport électronique par des méthodes de fonctions de Green, dans un formalisme de liaisons fortes, pour les jonctions atomiques. Ces calculs ont permis de mettre en évidence l'importance des effets de polarisation orbitale et fournissent une interprétation des expériences du groupe de M. Viret. F. Piéchon a clôturé la réunion par un exposé théorique sur l'application de la théorie de Boltzmann au transfert de spin.

Ces journées thématiques ont permis de réunir une communauté autour des différents aspects du nano-magnétisme :

- Recherche et fabrication de nouveaux matériaux (notamment à forte anisotropie)
- Développement de nouvelles techniques expérimentales et théoriques pour l'étude du magnétisme à l'échelle nanométrique.
- Electronique de spin

Ces journées ont semble-t-il été bien appréciées par les participants..

Il est enfin remarquable que la représentation de la communauté DFT ne composait que le 1/3 des participants (6 exposés sur 18), ce qui est à peu près représentatif de la situation actuelle en France. On note en effet que même si la communauté DFT prend de plus en plus d'ampleur ces dernières années, il existe encore assez peu d'études sur le magnétisme (ou bien plus du côté des électrons fortement corrélés). La venue de nombreux expérimentateurs à cette rencontre du GDR DFT++ montre cependant toutes les attentes de la communauté dans ce domaine. Cette demande de calculs faisant appel à la structure électronique devrait même s'amplifier du fait de la miniaturisation continue des composants.