République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

> UNIVERSITE d'ADRAR FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE



MEMOIRE DE FIN D'ETUDE POUR obtenir Le diplôme de

MASTER en PHYSIQUE du Matériaux

Thème

Propriétés dynamique et de diffusion d'ondes de spin dans une chaine ferromagnétique de spin A perturbée par une impureté de spin B

Présenté par :	Président :
M : HACHEMI NADIR	M : DALIL Ahmed Univ d'adrar
Encadré par :	Examinateurs

Pr: RACHID TIGRINE Univ d'adrar

M :Boudaoud Elhoiria Univ d'adrar

Promotion: 2015/2016

REMERCIMENTS

Au début de ce travail, nous sommes heureux d'étendre nos remerciements à tous les professeurs du Département de science de la matière (Faculté des sciences et de la technologie à l'Université d'Adrar) pour tous les conseils et tous les efforts déployés pendant la période d'étude, et en particulier Nous remercions le superviseur professeur tigrine rachide sur ses conseils et de l'orientation et debout avec nous tout au long de la préparation de cette mémoire.

Aussi, ne pas oublier de remercier le chef du département du sciences de la matière Boussaaid Mohamed.

Dédicace

Je dédie cette humble à travailler:

Pour ma parentes bien-aimée peut Dieu prolonger la vie et le plaisir.

Pour mes collèges qui encouragent encore moi de continuer à étudier au plus haut niveau et assumer des responsabilités pour la famille pour une recherche à temps plein.

Nadir

PLAN DE THESE

INTRODUCTION1		
CHAPITRE I. RAPPELS SUR LES ONDES DE SPIN FERROMAGNETIQUES	5	
I.1 Caractéristiques du ferromagnétisme	6	
I.2 Les matériaux ferromagnétiques et leurs domaines d'applications	6	
I.3 Interprétation du ferromagnétisme	7	
I.3.1 Modèle phénoménologique de Weiss (1908)	7	
I.3.1.1 Hypothèse de <i>Weiss</i> (champ moléculaire)	8	
1.3.1.2 Température de <i>Curie</i>	8	
1.3.2 Interpretation d' <i>Heisenberg</i>	11	
1.3.2.1 Interaction d echange	11 12	
I.5.2.2 L'approximation du champ moyen (interpretation du champ de <i>weiss)</i>	12	
I 4 1 Origine et principe de création d'une onde de spin	13	
I.4.2 Relation de dispersion des magnons	16	
1 12 Relation de dispersion des magnons magnons		
CHAPITRE II. DYNAMIQUE DES SPINS DANS LES SYSTEMES		
FERROMAGNETIQUES	21	
II.1 Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques ordonnés	22	
II.1.1 Propriétés de symétrie	22	
II.1.2 Equations de mouvement et matrice dynamique	22	
II.2 Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnetiques desordonnes	25	
II.2.1 Rapper II.2.2 Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des	23	
états de magnons localisés au voisinage d'un défaut magnétique	28	
etats de magnons locanses du voismage à un delaut magnetique		
CHAPITRE III. MODELISATION DE LA DIFFUSION D'ONDES DE		
SPIN PAR UNE INTERFACE MAGNETIQUE	32	
III.1 Présentation du modèle	33	
III.2.1 Equations de mouvements	35	
III.2.2 Relations de dispersion	39	
III.2.3 Vitesses de groupe	40	
III.2.4 Modes attenues	42	
III.2.5 Courbes de dispersion à 5D	4 <u>3</u> ///	
III.3 1 Matrice dynamique du système	+ <u>+</u> ⊿5	
III.3.2 Matrice de raccordement		
III.3.3 Résultats et discussion		
III.4 Densité d'états de magnons	47	

III.4.1 Méthode de calcul	<u>48</u>
III.4.2 Résultats et discussion	<u>49</u>
_III.5 Etude de la diffusion	<u>50</u>
III.5.1 Coefficients de transmissions et de réflexions	5 <u>1</u>
III.5.2 Conductance magnonique	52
CONCLUSION	54
LISTE DES REFERENCES	
ANNEXE 1. QUANTIFICATION DES ONDES DE SPIN	61

ANNEXE 2. CALCUL DE LA VITESSE DE GROUPE D'UNE ONDE DE SPIN64

INTRODUCTION

La science des surfaces et interfaces a enregistrée ces dernières années un grand développement sur le plan de la recherche fondamentale et appliqué. ¹⁻⁵ L'intérêt porté à la connaissance des propriétés des surfaces/interfaces est stimulé par l'importance pratique de domaines d'applications très divers: catalyse, corrosion, croissance cristalline, technologie et propriétés de nouveaux matériaux multicouches et nanométriques (semi-conducteurs, métalliques, magnétiques,...etc.).

L'évolution continue, depuis une dizaine d'années, vers l'étude des systèmes magnétiques de très faibles dimensions a été spectaculaire et sera durable. Elle n'est pas seulement dictée par un souci de miniaturisation pour accroître la capacité et l'efficacité des composants, mais surtout par l'apparition aux échelles de longueurs nanométriques de nouveaux effets physiques et de nouvelles propriétés. En effet, depuis la fin des années 1980, les nano structures magnétiques ont ouvert des perspectives nouvelles tant dans le domaine fondamental que dans celui des applications pour les mémoires à super densité de Stockage.⁶⁻¹³Les films ultraminces et nano fils, présentent de par leurs faibles dimensions des propriétés quantiques nouvelles basées sur la diffusion électronique dépendant du spin des électrons débouchant sur les effets de valve de spin et des effets tunnel magnétiques.

Les "*nano sciences, nanotechnologies et nanomatériaux*" constituent un des grands secteurs interdisciplinaires jugés prioritaires par la plupart des laboratoires de recherches. Plusieurs méthodes de nanofabrication sont actuellement explorées telles que la nanolithogravure par rayon X ou par électrons, la croissance localisée d'ilôts magnétiques sur des films et les dépôts par microscope à force atomique ou a effet tunnel. Ces technologies peuvent contrôler de façon précise les dimensions, la forme, l'espacement et l'architecture des nanostructures et de là, déterminer leurs propriétés magnétiques telles que la formation des domaines, les processus de renversement de l'aimantation, la coercitivité ou la magnétorésistance. Déjà des réseaux de plots de Ni de 15 à 20 *nm* de large ont été fabriqués par lithogravure électronique, laissant entrevoir dans les 10 à 20 années à venir la faisabilité d'une mémoire de densité dépassant largement les 12 *G bits/cm*² obtenus récemment en laboratoire (Université du Minnesota). Les nanostructures magnétiques lithogravées seront un axe majeur de recherche du magnétisme dans les années à venir.¹⁴

Par ailleurs la connaissance des propriétés magnétiques de couches ultraminces (quelques plans atomiques) et multicouches ferromagnétiques suscite un intérêt considérable. De nouvelles propriétés spectaculaires dues aux surfaces/interfaces ont été mises en évidence et qui dominent les effets de volume dans ces structures feuilletées.^{15,16} Elles donnent ainsi naissance à des caractéristiques nouvelles: l'anisotropie magnétique perpendiculaire, liée à l'existence d'une forte anisotropie d'interface (multicouches Co/Au, Co/Pd, Co/Pt, Co/Ru,...etc.), magnétorésistance «géantes » (dans les couches ferromagnétiques coulées antiferromagnétiquement et les structures «vannes de spin »), ou effets magnéto-optiques augmentés, en particulier dans l'ultraviolet (Co/Pt, Co/Pd). Ces propriétés sont ajustables en fonction des paramètres comme l'épaisseur des couches, la nature des métaux en contact, ou la concentration des constituants dans les couches d'alliages, ce qui permet une véritable ingénierie de matériaux synthétiques nouveaux. Ces structures artificielles ont des applications potentielles considérables dans le domaine des capteurs ou du stockage de l'information.^{17,18}

Tout solide, se trouve généralement limité par une surface ou une interface de contact avec le milieu qui l'entour (un vide, un autre matériau,...etc.). L'existence de cette surface ou interface, constitue une brisure de symétrie, qui peut affecter et modifier profondément les propriétés physiques et dynamiques du solide. Le désordre, tel que les marches atomiques, les nano structures et les interfaces qu'on peut rencontrer dans les systèmes magnétiques de basses dimensions ,¹⁹⁻²¹peut fortement influencer la propagation des ondes de spin dans ces milieux. Cela peut mener à plusieurs effets tels que : des changements dans les propriétés thermiques de ces films, l'apparition d'états nouveaux qui sont localisés aux voisinages des défauts et enfin la diffusion des modes de surface et de volume.²²⁻²⁵ Des études théoriques ont été effectuées pour étudier l'effet des marches atomiques sur le comportement de l'aimantation^{17,26} et voir l'influence de l'anisotropie magnétique à l'interface et l'interaction d'échange sur les propriétés magnétiques.^{7,27}

La présence d'états de magnons localisés dus à des défauts brisant la symétrie de translation dans les systèmes ferromagnétiques, a été mise en évidence par analogie avec les vibrations cristallines.²⁸⁻³¹ Depuis des efforts considérables ont été développés pour la compréhension du comportement des excitations magnétiques.^{6,22,32-34} En revanche les études concernant la diffusion d'ondes de spin ou de magnons par des défauts implantés dans des guides d'ondes cristallographiques n'ont pas reçues l'attention qu'elles méritent. De là vient le but essentiel de notre travail, qui consiste à faire une étude théorique et de simulation numérique sur les propriétés de localisation et de diffusion d'ondes de spin (ou de magnons) dans les systèmes ferromagnétiques quasi-bidimensionnels désordonnés. Nous avons choisi d'appliquer cette étude à deux différents systèmes ferromagnétiques mésoscopiques désordonnés. Le premier présente une interface magnétique infinie comme défaut, tandis que le deuxième présente en plus de celle-ci, une marche monoatomique qui s'étale en surface.

Dans le premier chapitre, nous avons donné les différents modèles permettant l'interprétation du ferromagnétisme, ainsi qu'un rappel sur la théorie des ondes de spin ferromagnétiques.

Au deuxième chapitre, nous avons rappelé les notions de bases de la dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques ordonnés ainsi que les principales méthodes théorique utilisées pour l'étude des systèmes magnétiques désordonnés. Un formalisme général de la méthode de raccordement sur laquelle est basée notre travail a été donné à la fin de ce chapitre.

Le chapitre III, constitue une modélisation de la diffusion d'ondes de spin par une chaîne infinie ferromagnétiques d'atome *A* perturbée par une impureté *B*. Celle-ci s'appuie essentiellement sur une approche théorique développée par Antoine Khater et ses collaborateurs³⁵⁻³⁸, adaptée initialement pour l'étude de la diffusion d'ondes de vibrations dans des structures cristallines désordonnées. Un calcul des différentes grandeurs physiques a été donné vers la fin du chapitre.

Au dernier chapitre, nous avons appliquons la même procédure qu'au chapitre IV mais cette fois-ci pour le calcul des états localisé et les densités d'états au voisinage du défaut. Des résultats numériques importants sont obtenus et sont discutés à la fin du chapitre.

- 3 -

Nous terminons notre travail par une conclusion qui illustre les principaux résultats obtenus à travers notre étude ainsi que les perspectives offertes dans ce domaine de recherche qui ouvre de nombreuses voies à la résolution des problèmes de diffusion dans les composants magnétiques de faibles dimensions.

Nous avons repoussé en annexes quelques développements secondaires qui auraient inutilement alourdi le cours de l'exposé. Ainsi nous avons fait un rappel sur la quantification des ondes de spin en annexe 1. En annexe 2, nous avons rappelés les différentes méthodes utilisées pour le calcul de la vitesse de groupe d'une onde de spin ferromagnétique.

CHAPITRE I

RAPPELS SUR LES ONDES DE SPIN FERROMAGNETIQUES

Le mouvement des particules chargées à l'intérieur des atomes donne lieu à la fois à des moments cinétiques (ou moments angulaires) et à des moments magnétiques. Un électron dans un atome effectue deux sorte de mouvements : le premier étant autour du noyau sur une orbite, il est caractérisé par un moment cinétique orbital ℓ , le deuxième étant autour de lui même, il est caractérisé par un moment cinétique intrinsèque dit moment de spin, celui-ci est noté par *s*. A ces deux moments cinétiques sont associés deux moments magnétiques : le moment magnétique orbital et le moment magnétique de spin.

Les moments magnétiques dus aux mouvements des électrons des couches incomplètes se combinent pour donner un moment magnétique atomique. Le nombre de moments magnétiques par unité de volume définie ce qu'on appelle en magnétisme l'aimantation. Celle-ci est une grandeur fondamentale du magnétisme, elle évolue généralement en fonction de deux paramètres principaux qui sont : le champ magnétique et la température.³⁹

Certains corps magnétiques, n'ont une aimantation qu'en présence d'un champ magnétique appliqué, ils sont appelés matériaux magnétiques à aimantation induite. Les paramagnétiques et les diamagnétiques font partie de cette classe de corps. Par ailleurs d'autres corps ont la particularité de posséder une aimantation même en absence de champ extérieur appliqué, ils sont appelés matériaux magnétiques à aimantation spontanée. On trouve dans cette classe de corps les matériaux ferromagnétiques, antiferromagnétiques, ferrimagnétiques et hélimagnétiques.

- 5 -

I.1 Caractéristiques du ferromagnétisme

Certains corps solides présentent une aimantation en l'absence de champ magnétique appliqué. Cette aimantation spontanée, connue depuis l'antiquité, est appelée le ferromagnétisme et les corps qui la possèdent les ferromagnétiques. Ces derniers sont utilisés dans le domaine de l'électricité industrielle, notamment dans la réalisation d'aimants artificiels et de machines électriques. On note que le ferromagnétisme est une propriété magnétique forte due à l'interaction entre atomes. Il n'existe que dans certains corps à l'état condensé et en dessous d'une certaine température appelée [«] *température de Curie* [»]. Au-dessus de T_C , le désordre thermique l'emporte sur les interactions mutuelles, et le matériau est dans un état paramagnétique.⁴⁰

Sous l'action d'un champ magnétique externe, les moments magnétiques des atomes constituants le matériau ferromagnétique s'alignent tous dans la même direction et dans le même sens que le champ extérieur: le moment magnétique total est maximal. Lorsque l'on supprime le champ extérieur, le matériau ferromagnétique conserve partiellement sa structure ordonnée et, de ce fait, une partie de son aimantation, en raison d'interactions entre les moments magnétiques des atomes au sein du matériau (théorie phénoménologique) et de phénomènes d'hystérésis (état magnétique antérieur du matériau).

Par ailleurs, la température joue un rôle déterminant sur les propriétés magnétiques des matériaux. En effet, soumises à la chaleur, les substances ferromagnétiques se transforment, peu à peu, en matériaux paramagnétiques. La perte complète des propriétés ferromagnétiques s'effectue à une température caractéristique de la substance considérée : cette température s'appelle " *température de Curie*", en hommage à *Pierre Curie* qui découvrit le phénomène en 1895. A titre d'exemple, la température de *Curie* du fer métallique est d'environ 770 °C.

I.2 Les matériaux ferromagnétiques et leurs domaines d'applications

Le magnétisme de la matière est source de propriétés variées qui sont à la base d'utilisations diverses des matériaux magnétiques en générales et des ferromagnétiques en particuliers. Les propriétés intrinsèques d'un matériau magnétique sont la température d'ordre magnétique, appelée aussi *température de Curie*, *l'aimantation spontanée* et *l'anisotropie magnétique*. Une autre propriété essentielle est *la coercitivité*. Le champ coercitif représente l'intensité du champ magnétique appliqué dans une direction antiparallèle à l'aimantation et requis pour renverser celle-ci. La coercitivité est liée à l'anisotropie magnétique ; elle peut être forte dans les alliages ou composés qui associent aux éléments de transitions des éléments de terres rares. Par ailleurs, la coercitivité est une propriété de nature extrinsèque qui dépend de façon critique de la microstructure ou de la nanostructure du matériau.

Les matériaux ferromagnétiques les plus courants sont le fer, le nickel et le cobalt. Il existe aussi des alliages plus ou moins complexes ayant cette propriété : le silmanal (argentmanganèse-aluminium), le vicalloy (fer-cobalt-vanadium), les ferrites (contenant de l'oxyde ferrique), ne sont que quelques exemples parmi la multitude des matériaux ferromagnétiques naturels ou synthétisés par l'homme.

Les applications des matériaux ferromagnétiques se répartissent pour l'essentiel dans trois grands domaines : l'énergie, l'information et les télécommunications. On distingue les matériaux ferromagnétiques mous, à cycle d'hystérésis étroit et à faible aimantation rémanente utilisés dans les transformateurs, moteurs ou alternateurs afin de limiter les pertes d'énergie, et les matériaux ferromagnétiques durs, à large cycle d'hystérésis et à forte aimantation rémanente utilisés pour fabriquer des aimants permanents ou pour le stockage d'informations sous forme magnétique (bandes magnétiques, disques durs et disquettes informatiques...etc.).

I.3 Interprétation du ferromagnétisme

I.3.1 Modèle phénoménologique de Weiss (1908)

La théorie phénoménologique du ferromagnétisme est due au physicien Français *Pierre Weiss*, qui étudiait depuis 1896 le magnétisme des cristaux. Cette théorie est historiquement la méthode la plus utilisée du fait de sa simplicité. Cependant, bien que la méthode arrive à expliquer assez bien un certaines nombres de phénomènes, elle est incapable de décrire d'autres, comme la variation expérimentale de l'aimantation à basse température selon la loi : $\Delta M(T) \approx T^{3/2}$.

I.3.1.1 Hypothèse de Weiss (champ moléculaire)

Enoncé : " Je suppose que chaque molécule est soumise de la part de celle qui l'entoure à une force égale à celle d'un champ uniforme proportionnel à l'intensité de l'aimantation et dans la même direction"

Weiss envisagea l'hypothèse d'une interaction purement magnétique entre les moments, qui tend à les alignés parallèlement entre eux. Cette interaction est représentée par un champ d'échange ou champ moléculaire, qui est supposé être proportionnel à l'aimantation spontanée moyenne. Il écrit ainsi :^{41,42}

où λ est la constante du champ moléculaire et M l'aimantation spontanée moyenne donnée par la relation :

Le champ moléculaire traduit une action d'orientation mutuelle de type coopératif, c'est-à-dire qu'une orientation plus grande des moments magnétiques entraîne un champ d'échange plus grand donc une action d'orientation importante : c'est un phénomène auto cohérent ou corrélé. L'effet d'ordre du champ d'échange est contrecarré par l'agitation thermique, et aux températures élevées l'ordre des spins est détruit.

I.3.1.2 Température de Curie

La température de *Curie* T_C est la température au-dessus de laquelle l'aimantation spontanée disparaît, elle sépare la phase paramagnétique désordonnée pour $T > T_C$ de la phase ferromagnétique ordonnée pour $T < T_C$. Pour trouver T_C en fonction de λ , considérons une phase paramagnétique et appliquons un champ magnétique H_a . Ce champ provoque une aimantation finie qui à son tour provoque un champ d'échange fini H_e . Si χ_p est la susceptibilité paramagnétique, alors on écrit :

$$M = \chi_{\rm p} \cdot (H_a + H_{\rm e}) \qquad \dots \dots \dots \dots \dots ({\rm I}, 3)$$

où :

C, étant la constante de Curie, elle est donnée par la relation suivante:

où μ_0 est la perméabilité du vide, k_B la constante de *Boltzmann* et μ le moment magnétique donné par : $\mu^2 = \mu_B^2 g^2 j(j+1)$ où μ_B est le magnéton de *Bohr*, g le facteur de *Landé* et j est un nombre quantique.

En portant les équations (I, 1) et (I, 4) dans (I, 3) on a :

$$M T = C \cdot (H_a + \lambda M) \qquad \dots \dots \dots \dots \dots (I, 6)$$

ce qui donne :

$$\chi = \frac{M}{H_{\text{s}}} = \frac{C}{T - C\lambda} \tag{I, 7}$$

La susceptibilité χ présente une singularité à $T = C\lambda$. En effet, à cette température (et au-dessous) il existe une aimantation spontanée, car si χ est infini, nous pouvons avoir une aimantation M fini pour un champ H_a nul. A partir de la relation (I, 7) nous tirons la loi de *Curie-Weiss* :

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}$$
 avec $T_C = \lambda C$ (I, 8)

Cette expression décrit assez bien la variation expérimentale de la susceptibilité dans la région paramagnétique au-dessus du point de *Curie*. Sur la figure ci-dessous, nous avons représenté la loi de *Curie-Weiss*. Comme le montre la figure, au dessous de la *température de Curie* T_C , le corps est dans un état ferromagnétique, par contre au dessus de T_C le corps devient paramagnétique.



Fig. I. 1 : Dépendance en température de la susceptibilité magnétique : loi de Curie- Weiss. Au dessous de T_C , le corps est dans un état ferromagnétique. Par contre pour des températures supérieures à T_C , le corps est dans un état paramagnétique.

A partir de la relation $T_C = \lambda C$, nous pouvons déterminer la valeur de la constante du champ moléculaire λ :

Reste à élucider (expliquer) la nature de l'interaction entre moments, autrement dit, l'origine physique du champ de *Weiss*. La réponse viendra avec l'avènement de la théorie quantique. Le physicien Allemand Werner K. Heisenberg, l'un des principaux fondateurs de la nouvelle théorie, émet l'hypothèse d'une interaction purement électrostatique et qui n'est effectivement formulable qu'en théorie quantique. Cette interprétation est toujours admise.

I.3.2 Interprétation d'Heisenberg

I.3.2.1 Interaction d'échange

La théorie de *Weiss* n'est pas suffisante pour interpréter le ferromagnétisme, car l'approximation du champ moyen néglige les fluctuations des moments magnétiques d'un site à un autre et l'interprétation de ce champ moléculaire ne peut être donnée d'une manière classique.

La vraie nature du ferromagnétisme a été révélée par Heisenberg et Dirac. L'énergie d'interaction entre deux atomes contient à côté des termes classiques, un terme supplémentaire qui n'a pas d'équivalent classique et qui est lié à l'indiscernabilité des électrons et au principe d'exclusion de Pauli : ce terme fût appelé énergie d'échange, il est donné par l'expression suivante :^{41,42}

où φ_a et φ_b sont des fonctions d'ondes électroniques des deux atomes proches voisins *i* et *j*.

Comme le montre la relation (I, 10), J_e dépends des fonctions d'ondes électroniques des deux atomes et surtout de leurs recouvrements. Cela fait que l'intégrale d'échange est très sensible à la distance entre ces atomes. En fait J_e diminue très vite lorsque celle-ci augmente, en pratique J_e est négligeable pour les paires d'atomes (*i*, *j*) plus éloignées que premiers voisins.

Selon Heisenberg l'expression de l'énergie d'interaction entre deux spins (i, j) est donnée par la relation :

L'intégrale d'échange J_e tends toujours à rendre les moments magnétiques des atomes voisins parallèles ou antiparallèles. Si J_e est positif, le couplage favorise le

parallélisme des spins. Le fer, le cobalt, le nickel sont exemplaires ; on dit que ces corps sont ferromagnétiques. Cependant si J_e est négatif, c'est l'antiparallélisme qui est favorisé. le chrome et le manganèse sont exemplaires; ces corps sont dit antiferromagnétiques.

I.3.2.2 L'approximation du champ moyen (interprétation du champ de Weiss)

Si nous supposons que toute la contribution au moment magnétique de l'atome provient de son spin (ainsi J se réduit à S), alors la relation entre moment magnétique μ et moment cinétique S sera donnée par :

où μ_B est le magnéton de *Bohr* et g est appelé facteur de *Landé*, il est égal à 2.0023, arrondi à 2.00 en général pour un spin électronique.

L'énergie d'interaction d'échange d'un atome avec l'ensemble des atomes environnants peut être mise sous la forme suivante :

la sommation est restreinte aux δ premiers voisins ; on suppose qu'ils occupent des sites équivalents de sorte que l'intégrale d'échange $J_e(i, j)$ ait la même valeur pour tous ces couples.

Afin d'interpréter le postulat de *P. Weiss* (Equation I. 1), *Stoner* propose de substituer à $\vec{\mu}^{j}$, sa valeur moyenne au sens statistique (ou moyenne sur le temps). Puisque tous les atomes sont identiques et disposés de façon équivalente, le moment moyen est indépendant de *j* : nous le noterons $\langle \vec{\mu} \rangle$. Par suite, $\sum_{j=1}^{\delta} \vec{\mu}^{j} = \delta \langle \vec{\mu} \rangle$. Ce qui donne à l'équation (I, 12) la forme suivante :

A partir de la, nous pouvons dire que l'ensemble des moments environnants agit sur $\vec{\mu}^{i}$ à la manière d'un champ magnétique H_{e} . Les équations (I, 1) et (I, 2), sont retrouvées en posant :

L'énergie total du système de N moments découle ainsi :

La somme \sum_{ij} porte sur tous les couples (i, j) premiers voisins. Le facteur 1/2 s'introduit au second membre afin de ne compter chaque couple qu'une seule fois.

Notons bien que le " champ moléculaire de *Weiss* " H_e : que l 'on nome maintenant champ d'échange, joue le rôle d'un champ magnétique réel dans les équations de l'énergie $-\mu$. H_e et du couple $\mu \times H_e$ s'exerçant sur un moment magnétique μ . Mais H_e n'est pas réellement un champ magnétique, il n'entre donc pas dans les équations de Maxwell : par exemple il n'y a pas de densité de courant J reliée à H_e par l'expression $\overrightarrow{\mu_0}J = \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{H}$.

I.4 Les ondes de spin ferromagnétiques

I.4.1 Origine et principe de création d'une onde de spin

Le champ moléculaire est incapable de décrire quantitativement les propriétés de la matière à basse température. En effet, dans ce domaine la nature des phénomènes est purement quantique.

Un champ magnétique appliqué ou une agitation thermique suffisent pour exciter un système de spin. Considérons un système ferromagnétique sur lequel un axe de quantification est établi, axe z par exemple. A 0 K, le système est dans son état fondamental qui correspond à un état d'ordre, dans lequel tous les spins sont parallèles et orientés dans un même sens (Fig.I. 2). Cet ordre est contrecarré par l'agitation thermique et aux températures élevées,

l'ordre des spins est détruit. Cela veut dire qu'au dessus de l'état fondamental existent des états excités qui seront occupés au fur et à mesure que la température augmente. Ces états correspondent à une perturbation ou une déviation collective de spins, qui se propagent de proche en proche, par l'effet des forces d'échanges qui s'exercent entre les spins atomique. Le système est alors parcouru par une onde de déviation de spins. L'existence de ces ondes a été établie en 1930 par *F. Bloch*, on les appelle [«] ondes de spin ».^{39,41}

Comme le montre la figure (I. 2), les ondes de spin sont des oscillations de l'orientation relative des vecteurs de spin du réseau. Ces ondes, sont analogue aux ondes vibrationnelles d'un réseau cristallin, elles sont quantifiées (voir annexe.1), et leurs quantum de quantification est appelé *«magnon »*. Comme les phonons, les magnons sont des pseudo particules bosons, qui à l'équilibre thermodynamique, se répartissent sur des états accessibles suivant la loi de *Bose-Einstein*.

Notons bien que, si l'on connaît les propriétés statistiques des magnons, on peut établir la dépendance entre le nombre de magnons excités et la température. En fait, il s'est avéré que le nombre de magnons excités croit avec la température en raison direct de $T^{-3/2}$. Cependant la variation relative de l'aimantation d'un ferromagnétique variée proportionnellement à $T^{-3/2}$:

Ce résultat dû à *Félix Bloch* est appelé [«] *la loi en T* $^{3/2}$ *de Bloch* [»]: elle a la forme trouvée expérimentalement. Par ailleurs, par diffraction des neutrons on a pu observé expérimentalement des ondes de spin jusqu' à des températures proches *de la température de Curie* et même parfois au-dessus de cette température.



Fig. I. 2 : Principe de création d'une onde de spin ferromagnétique.

 \hat{A} T = 0 K, les vecteurs de spin d'un système ferromagnétique sont parallèles est orientés dans un même sens. Par contre pour des températures un peu plus supérieures à 0 K, le système de spins est excité et les vecteurs de spin subissent des déviations collectives qui se propagent d'un spin à son plus proche voisin. Ces déviations ont une forme d'une onde qui se propage, il porte le nom « onde de spin ».

I.4.2 Relation de dispersion des magnons

La relation de dispersion des magnons pourra être obtenue à l'aide d'un traitement semi classique simple⁴². Pour cela considérons par exemple le cas d'une chaîne linéaire de spin. Si p étant l'indice donnant la position d'un spin le long de la chaîne, alors chaque spin est lié à ses plus proches voisins par *«l'interaction d'Heisenberg»*:

les termes de l'équation (I,18) qui font intervenir le $p^{i eme}$ spin sont :

Le moment magnétique au site *p* est donné par la relation :

en portant cette relation dans l'équation (I,19), nous obtiendrons :

qui est de la forme :

avec :

le champ B_p est considéré comme étant un champ magnétique ou un champ d'échange qui agit sur le $p^{i \hat{e}me}$ spin.

D'après la mécanique élémentaire, la vitesse de variation du moment cinétique $\hbar \vec{S}_p$ est égale au couple $\vec{\mu}_p \times \vec{B}_p$ qui agit sur le spin *p*, on écrit ainsi :

soit :

Maintenant, si \vec{S}_p^x , \vec{S}_p^y et \vec{S}_p^z sont les composantes du vecteur spin \vec{S}_p , le long des axes *x*, *y* et *z* respectivement (Fig.I. 3), alors en coordonnées cartésiennes on aura :



Fig. I. 3 : Les composantes \vec{S}_p^x , \vec{S}_p^y et \vec{S}_p^z d'un vecteur de spin \vec{S}_p , le long des trois directions cartésiennes x, y et z respectivement.

Comme on voit bien, les équations (I, 26) font intervenir des produits de composantes de spin, elles ne sont donc pas linéaires. Si l'amplitude de l'excitation est faible (c'est-à-dire si $S_p^x, S_p^y \ll S$), nous pouvons obtenir un système approché d'équations linéaires en prenant $S_p^z = S$, et en négligeant les termes faisant intervenir le produit de S_p^x

et S_p^y qui apparaissent dans l'expression de $\frac{d S_p^z}{dt}$. Ces équations linéaires sont :

$$\frac{dS_p^y}{dt} = \frac{-2JS}{\hbar} (2S_p^x - S_{p-1}^x - S_{p+1}^x) \quad (I, 27-b)$$

$$dS_p^z$$

$$\frac{dt}{dt} = 0.$$

Nous cherchons comme solution du système d'équations (I, 27-a et I, 27-b) des ondes (non stationnaires) progressives ayant la forme :

$$S_{p}^{x} = u e^{i(pka-\omega t)}; \quad S_{p}^{y} = v e^{i(pka-\omega t)}$$
(I, 28)

où u, v sont des constantes, p un entier, et a le paramètre de la maille magnétique. Par substitution dans le système d'équations (I, 27-a et I, 27-b), nous obtenons :

$$-i\boldsymbol{\omega} v = -(2JS/\hbar)(2 - e^{-ika} - e^{ika})u = -(4JS/\hbar)[1 - \cos(ka)]u \qquad \dots \dots \dots \dots (I, 29-b)$$

Ce système d'équations en u et v admet une solution si le déterminant des coefficients est nul c'est-à-dire si :

$$\begin{vmatrix} i\boldsymbol{\omega} & (4JS/\hbar)[1-\cos(ka)] \\ -(4JS/\hbar)[1-\cos(ka)] & i\boldsymbol{\omega} \end{vmatrix} = 0$$

d'où :

ou bien :

$$E(k) = [1 - \cos(ka)]$$
(I, 31)

où :

La courbe donnant la variation de l'énergie normalisée E en fonction du vecteur d'onde k est représentée sur la figure (I. 4) ci-dessous :



Fig. I. 4 : Relation de dispersion pour les ondes de spin dans un corps ferromagnétique unidimensionnel avec interactions d'échange limitées aux plus proches voisins

A l'aide de l'équation (I. 30), nous pouvons montré qu'un vecteur de spin S quelconque effectue une précession circulaire d'amplitude u, autour de l'axe de quantification z. En effet lorsqu' on injecte oméga dans les équations (I, 29-a et I, 29-b), on trouve : v=-iu. En prenant les parties réelles de (I. 28), avec v=-iu on trouve :

$$S_p^x = u\cos(pka - \omega t)$$
; $S_p^y = u\sin(pka - \omega t)$ (I, 33)

Cette précession autour de l'axe de quantification z, est transmise d'un spin à son voisin, sous forme d'une onde dite onde de spin.

Aux grandes longueurs d'ondes c'est-à-dire pour $ka \ll 1$, on a $[1-\cos(ka)] \approx \frac{1}{2}(ka)^2$. Dans ce cas là, (I. 31) devient :

$$E(k) \approx \frac{1}{2}a^2k^2$$
(I, 34)

Nous remarquons ici, à travers ce résultat, qu'on a une variation quadratique de l'énergie d'un magnon, alors que dans les mêmes conditions, l'énergie d'un phonon est proportionnelle à k.

CHAPITRE II

DYNAMIQUE DES SPINS DANS LES SYSTEMES FERROMAGNETIQUES

Certains corps magnétiques n'acquièrent une aimantation qu'en présence d'un champ magnétique appliqué, tandis que d'autres, comme les ferromagnétiques, possèdent une aimantation même en absence de champ magnétique appliqué. Celle-ci est connue sous le nom d'aimantation spontanée, elle provient du couplage des spins atomiques qui sont localisés sur les différents sites du réseau solide.⁴⁰

Au zéro absolue, un système ferromagnétique est dans son état fondamentale, où tout les spins sont parallèles entres eux, et orientés dans un même sens. Une agitation thermique ou une excitation magnétique, suffit pour exciter ce système de spins. Les excitations élémentaires, d'un système de spins sont de nature ondulatoire, elles portent le nom d'ondes de spin. Ces oscillations proviennent de l'orientation relative des spins du réseau. Elles sont semblables aux ondes élastiques dans un cristal, qui proviennent des oscillations, relatives des atomes dans le réseau.⁴²

Dans ce chapitre, nous rappelons brièvement quelques notions de bases de la dynamique des spins dans les solides ferromagnétiques ordonnés, ensuite nous présentons les différentes méthodes théoriques qui sont développées aujourd'hui pour l'étude des systèmes ferromagnétiques désordonnés. Nous avons consacré le dernier paragraphe pour décrire le formalisme général de la méthode de raccordement, que nous allons utilisée dans notre étude pour la détermination des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut, ainsi que l'étude de la diffusion d'ondes de spin dans des systèmes ferromagnétiques désordonnés de basses dimensions.

II.1 Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques ordonnés *II.1.1 Propriétés de symétrie*

Du fait de la périodicité spatiale d'un réseau cristallin, deux atomes occupant deux sites équivalents du réseau effectues, à une phase près les mêmes mouvements vibrationnels. Les conditions aux limites périodiques, appelées aussi conditions de *Born Von Karman*,⁴⁵ permettent, par simple translation d'un cristal fini de *N* atomes, de modéliser la dynamique vibrationnelle d'un cristal infini. Comme dans le cas des phonons, la dynamique précessionnelle des vecteurs de spin d'un système ferromagnétique infini est gouvernée par les conditions aux limites périodiques. En fait celles-ci permettent par simple translation d'un cristal fini celles-ci permettent par simple translation d'un cristal fini celles-ci permettent par simple translation d'une maille élémentaire de spins de décrire la dynamique précessionnelle des vecteurs de spin d'un système ferromagnétique infini est gouvernée par les conditions aux limites périodiques. En fait celles-ci permettent par simple translation d'une maille élémentaire de spins de décrire la dynamique précessionnelle des vecteurs de spin d'un cristal ferromagnétique infini ou bien illimité.

II.1.2 Equations de mouvement et matrice dynamique

Considérons un système ferromagnétique composé de N spins excités par un mode précessionnel de fréquence angulaire ω . Soit a_x , a_y et a_z les trois vecteurs de base définissants la maille élémentaire du système considéré. Le vecteur position peut être alors défini par :

où (n, s, m), sont des entiers naturels positifs, négatifs ou nuls.

Les excitations magnétiques d'un système de spins, sont décrites à partir d'un Hamiltonien *H* dit *d'Heisenberg*,⁴⁶⁻⁴⁸ décrivant toutes les interactions entre premiers voisins, en présence d'un champ magnétique total $B_T(m)$, dans la direction de quantification (axe *z* par exemple). Celui-ci est donné généralement sous la forme suivante :

- S_p et $S_{p'}$ sont deux vecteurs de spin situés sur les sites p et p' du réseau magnétique.
- J (p, p') est un scalaire, positif dans notre cas, la théorie quantique le donne sous forme d'une intégrale appelée [«] intégrale d'échange [»]. Sa valeur dépend des fonctions

d'ondes électroniques des deux atomes et surtout de leur recouvrement. Notons bien que cette intégrale est très sensible à la distance entre les deux atomes : elle diminue très vite lorsque celle-ci augmente ; en pratique J(p, p') est négligeable pour la paire d'atome (p, p') plus éloignée que premiers voisins.⁴¹

B_T (*m*) est la somme d'un champ magnétique extérieur appliqué *B_{ext}* et un champ d'anisotropie *B_{anis}* :

$$B_T(m) = B_{ext} + B_{anis}$$

La sommation dans l'équation (II, 2) est effectuée sur toutes les paires de spins (p, p') en interaction du système : chaque paires étant dénombrée une seule foi.

Le mouvement de précession d'un vecteur de spin S_p situé sur un site p quelconque du réseau de spins est donné par l'équation de *Landau-Lifshitz*:^{16,49-52}

Où S_p est le vecteur de spin d'un atome se trouvant sur le site p de coordonnées n, s et m, suivant les trois directions cartésiennes x, y et z respectivement. Les nombres : n, s et m sont des entiers naturels positives, négatives ou nulles.

 γ est un rapport dit gyromagnétique, il est donné par la relation :

$$\gamma = \frac{g \,\mu_B}{\hbar} \tag{II. 4}$$

 \vec{H}_{p}^{eff} est un champ effectif régnant sur le site p. Celui-ci est donné par :

où $\nabla(S_p)$ est le vecteur gradient par rapport au vecteur spin S_p , et H_p étant *l'Hamiltonien d'Heisenberg*.

En introduisant la quantité :

$$S_{p}^{+} = S_{p}^{x} + iS_{p}^{y}$$
 (II. 6)

et en cherchant des solutions d'ondes planes de la forme :

l'équation générale du mouvement de précession d'un vecteur de spin sur un site p de coordonnées n, s et m, en absence de champ magnétique total est donnée sous la forme suivante : ^{8,22,25,32,51}

où la quantité u(n, s, m), représente l'amplitude de l'onde de spin.

L'équation du mouvement (II, 8), peut être écrite pour tous les N vecteurs de spins du système ferromagnétique considéré. Nous sommes alors en présence d'un système à Néquations de mouvements qu'on ne peut pas résoudre. Par ailleurs un système ferromagnétique infini composé d'une répétition périodique dans l'espace de Bloch, de cellules magnétiques contenant ℓ spins, présente l'avantage de la symétrie de translation, qui avec les conditions aux limites périodiques, permet de réduire le champ de précession des vecteurs de spin. En effet, du fait de la périodicité spatial du réseau cristallin, deux vecteurs de spin S_p et $S_{p'}$ occupant deux sites équivalents du réseau magnétique de spins, effectuent à une phase près les mêmes mouvements de précessions. Par conséquent, leurs amplitudes de précession vérifient à chaque instant t, la relation suivante :⁸

$$\vec{u}(p',\boldsymbol{\omega}) = \vec{u}(p,\boldsymbol{\omega}) \cdot \exp^{iq.r(p,p')}$$
 (II. 9)

où q est un vecteur d'onde du réseau réciproque du cristal, et r(p, p') est un vecteur joignant la position d'équilibre du spin p à celle du spin p'.

La relation (II, 9), nous permet alors de réduire le système d'équation (II, 8) contenant N équations à un système à ℓ équations homogènes à ℓ inconnues, qu'on peut mettre sous la forme matricielle suivante :

où M_d est la matrice dynamique ($\ell \ge \ell$), dont les éléments dépendent généralement des constantes d'échanges entre les spins ainsi que de la valeur du quantum de spin du système; I est une matrice identité, et $|u\rangle$ le vecteur propre associé aux amplitudes de précession des vecteurs de spin de la cellule magnétique.

Pour que le système d'équation (II, 10) ait des solutions en ω non triviales, il faut que le déterminant soit nul, c'est-à-dire :

Ainsi grâce à cette condition de compatibilité qui fournit une équation algébrique en ω , on peut déterminer les différents modes de précessions du solides, qui sont caractérisés par les ℓ solutions ω_s , avec s = 1, 2, 3, ..., ℓ et $\omega_s > 0$.

II.2 Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques désordonnés *II.2.1 Rappel*

Le formalisme qu'on a décrit dans la section précédente, basé sur les [«] *conditions aux limites de Born et Von Kerman* [»] s'applique uniquement à des systèmes périodiques infinis. Or, dans le cas des systèmes magnétiques désordonnés, l'absence de symétrie de translation dans une direction donnée rend impossible l'application de ces conditions. Autrement dit le théorème de Bloch n'est pas applicable suivant cette direction. D'où la nécessité d'utiliser de nouvelles formulations théoriques afin de réaliser un couplage entre les équations du mouvement d'une couche atomique à l'autre. Ces formulations permettent, soit de résoudre des systèmes infinis d'équations, soit de limiter, dans une approximation valable, le nombre d'équations et le nombre d'inconnues.⁵³ Actuellement plusieurs méthodes ont été élaborées et adaptées à l'étude des systèmes magnétiques désordonnés pour le calculs des états de magnons localisés, ainsi que pour l'étude du phénomène de diffusion d'onde de spin. Parmi celles-ci, on peut citer :

• La méthode de diagonalisation direct (ou Slab méthode)

Introduite par formulation général de *Clark* en 1965, ensuite elle a été appliquée à un système physique par *Allen* et *Alldredge*, qui se sont plus particulièrement intéressés aux modes de surfaces d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche adsorbée.⁵⁴ Durant les vingt dernières années, cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour l'étude des phonons et des magnons. Pour ces derniers le principe de la méthode consiste à limiter les systèmes magnétiques étudiés à un nombre fini de plans atomiques de structure périodique dans une direction donnée (direction *z* par exemple), avec une extension infini dans les deux autres directions cartésiennes *x* et *y*. Afin de garantir l'existence d'une région de volume au centre du système, le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand, ce qui engendre des difficultés de calcul lors des simulations numériques dues à la taille de la matrice dynamique.

Dans un premier temps, l'écriture des équations du mouvement de précessions des vecteurs de spin d'un système magnétique, permet d'en déduire la matrice dynamique décrivant les équations linéaires liant les amplitudes de précession des vecteurs de spin. La résolution numérique de la matrice dynamique détermine les valeurs propres ainsi que les vecteurs propres correspondants, ce qui donne accès au calcul des courbes de dispersions et de densités d'états des magnons de surface, ce qui permet ainsi de développer les connaissances concernant les propriétés magnétiques des surfaces et des interface.

<u>La méthode des fonctions de Green</u>

Cette méthode a été introduite pour la première fois par *Lifshitz* et *Rosenzweig* en 1948,⁵⁵ dans le but d'étudier les modes de vibration localisés. Plus tard elle est devenue une technique de référence souvent utilisée dans la détermination des états de magnons localisés en surface.^{46, 56-58}

Le principe de la méthode consiste à créer un réseau semi-infini à partir d'un réseau illimité, en annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre du plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. L'effet de cette modification sur la dynamique des spins peut être alors interprétée comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique M_d du système magnétique illimité en une matrice M_S qui s'écrit sous la forme :

$$M_S = M_d + M_P \tag{II. 12}$$

Où M_P représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle dont l'ordre fini dépend du nombre de plans affectés par la perturbation.

Si $G(\omega)$ est la matrice des fonctions de Green définie par :

Son équivalent $G_S(\omega)$ pour le système perturbé s'écrit :

$$G_{S}(\omega) = [\omega I - (M_{d} + M_{P})]^{-1}$$

$$\Rightarrow \quad G_{S}(\omega) = \left[(\omega I - M_{d}) \cdot (I - \frac{M_{P}}{\omega I - M_{d}}) \right]^{-1}$$

$$\Rightarrow \quad G_{S}(\omega) = [(\omega I - M_{d}) \cdot \{I - G(\omega) \cdot M_{P}\}]^{-1}$$

d'où la relation matricielle suivante:

L'ensemble des états de précessions du système perturbé est alors donné par les pôles de la fonction $G_S(\omega)$. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par la surface libre sur les spectres de précession des spins.

• La méthode de raccordement

La méthode de raccordement, sur laquelle est basé notre travail, trouve ses origines dans l'étude théorique de la dynamique vibrationnelle des surfaces ordonnées. Elle a été introduite pour la première fois par *Feuchtwang* en 1967,⁵⁹ lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à trois dimensions. Par suite, cette méthode a été reprise en 1987 par *Szeftel* et *Khater* dans deux articles; ^{35,60} le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le seconde est une application direct aux surfaces *Ni* (100) et *Ni* (100) + c (2x2).

La méthode de raccordement a été ensuite reprise et développer dans l'étude des ondes de spin au voisinage des surfaces par certaines auteurs, plus particulièrement on peut citer les travaux de M. G. Cottam, A. Khater, Abou. Ghantous. Le formalisme général décrivant le principe de la méthode est donné aux paragraphes suivants.

II.2.2 Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut magnétique

La méthode de raccordement a été introduite afin d'en déduire une approche analytique pour déterminer les courbes de dispersions des modes localisés et les spectres de résonance dans les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode à l'étude des états de magnons localisés au voisinage d'une interface magnétique couplant deux différents semi-infini *Heisenberg* ferromagnétiques, consiste à décrire les mouvements de précession des vecteurs de spin des deux systèmes semi-infini par un nombre fini d'équations,^{35,60-62}et cela en divisant l'espace du solide en trois régions (Fig.II.1) :

• La région de volume

C'est une partie du réseau de spin qui se trouve loin de l'interface de contacte (loin du défaut), c'est-à-dire hors de la portée de tous les effets de celle-ci. Cette région est caractérisée par sa périodicité tridimensionnelles et elle permet le tracé des courbes de dispersions des magnons en volume.

• La région de défaut

Elle est composée des premiers plans atomiques du système formant l'interface de contacte. Cette région a une périodicité deux dimensionnelle et une symétrie de translation planaire; elle a en général des propriétés différentes de celle du volume.

• La région de raccordement

Elle est composée des plans atomiques situés entre la région de volume et la région de défaut. Cette région permet, dans la modélisation théorique proposée, de raccorder analytiquement les modes de l'interface avec les modes évanescents de la région de volume.



Fig.II.1: Représentation schématique de l'interface magnétique couplant deux différents semi-infinis Heisenberg ferromagnétiques selon le concept introduit par la méthode raccordement ; visualisation des régions : de défaut (RD), de raccordement { (RRG) et (RRD) } et de volume { (RVG) et (RVD) }.

Compte tenu de la brisure de symétrie dans la direction normale au défaut, la relation pour les amplitudes de précession des vecteurs de spin dans la direction cartésienne α , entre d'une part un vecteur de spin p appartenant à un plan n et d'autre part un vecteur spin p'appartenant à un autre plan n', tous deux parallèle au défaut mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

où Z est un facteur de phase inconnu, évalué dans la direction normale à l'interface magnétique, tel que $|Z| \le 1$, q étant un vecteur d'onde dans *la première zone de Brillouin*, et α caractérise une des trois directions cartésiennes x, y et z.

En insérant l'équation (II, 15) dans les équations de mouvements (II, 8), on obtient un système d'équations pour les amplitudes de précessions $|u\rangle = |u_{\alpha}(p, \omega)\rangle$ des vecteurs de spin d'une maille élémentaire dans le volume, qui peuvent s'écrire analytiquement:

$$\boldsymbol{\omega} u(n,s,m) = 2 \frac{J_A S_A}{\hbar} \{ 6 u(n,s,m) - [u(n-1,s,m) + u(n+1,s,m)] - [u(n,s-1,m) + u(n,s+1,m)] \dots (II. 16) - [u(n,s,m-1) + u(n,s,m+1)] \}$$

ou sous la forme matricielle suivante :

La condition de compatibilité de ce système donne accès pour chaque donnée (q, ω) à une équation polynomiale en Z dont les solutions caractérisent les différents modes de précessions en volume suivant la direction normale à l'interface magnétique. Les solutions telles que |Z|=1, sont des modes itinérants, et celles vérifiant la condition |Z|<1, correspondent à des modes évanescents.

La détermination des états de magnons localisés au voisinage de l'interface magnétique, commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine (q, ω). Puis, nous déterminons les équations du mouvements de précessions (II, 8) des vecteurs de spin représentatif des trois régions définis auparavant. Ceci conduit naturellement à un système matriciel M_d d'équations rectangulaire ayant le nombre d'équations plus petit que le nombre d'amplitudes de précessions inconnues.⁹ Afin de pouvoir résoudre un tel système, on peut réduire le nombre de variables pour en avoir un système d'équations homogène facile à résoudre. Ainsi, pour cela, on décrit pour chaque donnée (q, ω) les amplitudes de précession des vecteurs de spin par des ondes évanescentes exprimées comme une combinaison linéaire sur les ℓ modes de précessions en volume, suivant la direction normale à l'interface magnétique. Ces ℓ modes correspondent au ℓ racines Z satisfaisant la condition |Z|<1, provenant de l'étude dynamique en volume. La relation suivante fait état de ce raccordement :⁶³

dans laquelle :

- *n* est la première coordonnée du vecteur spin *p* considéré, avec *n* ≥ *n_i* où *n_i* représente la coordonnée du premier plan atomique à l'interface suivant la direction *x*.
- α parcourt les trois directions cartésiennes x, y et z.
- ℓ est le nombre de modes évanescents, déterminés dans l'étude en volume.
- R_{ν} est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent ν dans la base{R}.
- Z_{ν} est le facteur de phase du mode évanescent ν de la matrice dynamique dans le volume.
- A (α, ν) représente le poids pondéré associé à la contribution du ν-ème mode évanescent dans la direction cartésienne α.

La connaissance simultanée des facteurs de phases Z_v caractérisant les modes évanescents, ainsi que des vecteurs propres correspondants, tous deux issus de l'étude dynamique en volume, nous permet de définir la matrice de raccordement M_R à l'aide des développements (II, 18). Le produit des deux matrices M_d et M_R ainsi définies, nous conduit à une matrice carrée M_S caractérisant un système d'équations homogènes pour lequel des solutions non triviales nous conduit à :

et aboutir donc à la détermination des modes de magnons localisés au voisinage de l'interface magnétique. Ainsi, il est alors possible de calculer les courbes de dispersions, les densités spectrales et les densités d'états associées aux différents modes localisés au voisinage de cette interface.

CHAPITRE III

DIFFUSION D'ONDES DE SPIN PAR UNE CHAINE FERROMAGNETIQUE

Les études concernant le phénomène de localisation d'ondes de spin dans des systèmes magnétiques désordonnés, ont été mises en évidence par analogie aux études faites sur les phonons. Au début, le formalisme décrivant ce phénomène a été traité de manière générale. Plus particulièrement, on peut citer les travaux de *Wallis* et *Maradudin* effectués en 1967.^{71,72} Deux ans plus tard, le problème d'états de magnons localisés à été repris par *R. E. De Wames* et *T. Wolfram.* Ces derniers ont calculé les états de magnons localisés en surface {100} et {110} d'une structure cubique simple.²⁸

A partir des années 80, un travail remarquable a été signalé dans l'étude des états de magnons localisés dans les systèmes magnétiques désordonnés.^{22,31,46,47} Le progrès signalé dans ce domaine de recherche est dû essentiellement à l'apparition de nouveaux concepts théoriques, au développement expérimental ainsi qu'à la puissance accrue des ordinateurs permettant des simulations sans cesses et plus élaborées.

Par ailleurs, avec la miniaturisation possible des composants électroniques incorporant des matériaux magnétiques, l'étude du comportement d'objets magnétiques mésoscopiques (10 nm à 1 μ m) est devenue un domaine de recherche en plein développement,^{8,20,25} et un besoin impératif. En effet, des modifications de propriétés magnétiques sont normalement attendues lorsque les dimensions latérales des objets deviennent de l'ordre de grandeur des paramètres intrinsèques qui sont la taille des domaines magnétiques (0,1 à 10 μ m), la longueur de diffusion de spin (10 à 200 nm) ou la largeur de paroi (10 nm). On peut toutefois se demander en deçà de quelle taille les propriétés d'un système mésoscopique diffèrent réellement des propriétés du solide massif et quelles sont alors les modifications apportées par la réduction de la taille du système massif.

L'objectif principal de ce chapitre est d'étudier le phénomène de diffusion d'ondes de spin dans un système ferromagnétique désordonné unidimensionnel. Celui-ci est une chaîne ferromagnétiques *d'atome A perturbée par une impureté B*. Pour cela nous avons adapté la méthode de raccordement, illustrée au chapitre précédent. Un calcul d'états de magnons localisés ainsi que de densités d'états des spins formants le défaut a été fait, afin de mettre en évidence les effets du défaut sur la propagation d'ondes de spin.

III.1 Présentation du modèle

Nous nous intéressons à l'étude de la diffusion d'ondes de spin dans une structure relativement simple, à savoir une chaîne ferromagnétique d'atome *A* perturbée par un atome *B*. Notre étude est limitée aux deux premiers voisins du défaut atomiques fi. Etant donné que une brisure de symétrie de translation dans la direction normale à la chaîne..

Sur la figure (III.1) ci-dessous, est illustré un schéma représentatif du système modèle que nous avons choisi pour étudier le phénomène de diffusion d'ondes de spin.

Tout d'abord nous avons attribué à chaque atome situé sur un site p un vecteur de spin S_p ,. L'indice indices (n) est un nombre entier donnant la position du spin le long de la direction cartésienne x.

La symétrie de translation se trouve brisée le long de l'axe x. Cela est dû essentiellement à la présence du défaut.

Notre étude est réalisée dans un cadre simple, où nous n'avons pas tenue compte de certains paramètres physiques (champ magnétique extérieur et champ d'anisotropie). Cela n'est pas un choix aléatoire mais dans le but de rendre légère les formulations mathématiques du problème ainsi que pour mieux contrôler les différents paramètres du système qui interviennent dans le calcul des équations du mouvement de précession des spins.

L'interaction d'échange entre les spins est perturbée par la présence de l'impureté magnétique, nous avons alors introduit les différents paramètres d'échange suivants :



Fig.III.1 : *Représentation schématique d'une chaîne ferromagnétique d'atome A perturbée par B. La zone grisée sur la figure constitue le domaine perturbé du système.*

- J_{AA} : interaction d'echange entre les spins appartenant a la region de volume du spin A.
 - J_{AB} : interaction d'échange entre les spins appartenant a la région perturbée.

Nous avons aussi noté les quantums de spins des deux atomes A et B, par S_A et S_B , respectivement. Par ailleurs, pour simplifier nos calculs numériques, nous avons introduit les paramètres suivants :

$$\gamma_{I} = J_{AB} / J_{AA} \qquad \dots \dots \dots \dots (\text{III, 1})$$

$$\gamma_{2} = S_{B} / S_{A} \qquad \dots \dots \dots \dots (\text{III, 2})$$

ainsi qu'une énergie réduite Ω donnée par :

III.2 Dynamique des spins dans les régions de volumes loin de l'interface III.2.1 Equations de mouvements

L'équation du mouvement d'un vecteur de spin S_p situé sur un site d'indice $p_A \equiv (n)$, appartenant à la région de volume du film A, peut être donnée sous la forme (Equation II. 8) :

$$\omega u_A(n) = 2 \frac{J_{AA} S_A}{\hbar} \{ 2 u_A(n) - [u_A(n-1) + u_A(n+1)] \}$$
 (III, 4)

où la quantité $u_A(n)$, représente l'amplitude de précession d'un vecteur de spin appartenant à la région de volume du spin *A*.

$$u_A(n\pm 1) = Z^{\pm}_A . u_A(n)$$
 (III, 5-a)

où :

les équations (III. 5-a) et (III, 6-a) deviennent :



Figure III.2

La figure (III. 2) ci-dessous nous montre la courbe de dispersion obtenue pour pour une chaîne perturbée. Nous l'appelons une branche acoustique.

III.2.3 Vitesses de groupe

Par définition, la vitesse de groupe d'une onde de spin est la vitesse du déplacement du paquet d'onde. Autrement dit c'est la vitesse à laquelle est transportée l'énergie où l'information dans le milieu. Elle est définie pour des vecteurs d'ondes q réels par l'expression suivante :

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q}$$
 Soit $\overrightarrow{V_g} = \overrightarrow{grad}_q \Omega(\overrightarrow{q})$ (III, 7)

Dans le cas où le vecteur d'onde q est complexe (non réel), nous imposons à la vitesse de groupe une valeur nulle, et on écrit : Vg = 0.

Pour déterminer cette vitesse, deux méthodes peuvent être utilisées : calcul par la méthode des différences finies et calcul par la méthode des perturbations. Le principe de ces deux méthodes est donné en annexe.1. Dans nos calculs, nous opterons plutôt pour la deuxième méthode qui est basée sur la théorie standard des perturbations utilisée également en mécanique quantique. Nous avons choisi cette méthode car elle est plus élégante et plus précise que la première par ce qu'elle comporte une étape analytique en plus. Cette méthode requiert néanmoins quelques calculs supplémentaires. La forme explicite de la vitesse de groupe donnée par cette méthode est :

où M_d est la matrice dynamique issue de l'étude en volume et u sont les vecteurs propres associés aux différents modes propres obtenues.



Figure.III.3

La figures (III.3), donnent l'allure de la vitesses de groupe V_g en fonction de l'énergie de diffusion Ω dans le guide d'ondes parfait elle suit la même plage de propagation que le facteur phase de volume.

III.2.4 Modes atténués

Les relations de dispersions telles que nous les avons calculées n'ont pas la forme convenable pour traiter le problème de diffusion d'ondes de spin à travers une interface magnétique. En effet lors d'un tel processus, c'est l'énergie qui est conservée et non pas le vecteur d'onde q. Il faut donc inverser le problème et prendre Ω comme variable indépendante, et on doit considérer non seulement les modes propageants mais tenir compte aussi des modes évanescents du système. En d'autre termes, pour chaque valeur de Ω donnée, on doit prendre toutes les solutions $|Z(i)| \leq 1$.

Pour avoir l'évolution des facteurs de phases Z_{ν} en fonction de l'énergie de diffusion Ω , nous utilisons la méthode de l'augmentation de la base. Comme son nom l'indique, celleci consiste en l'augmentation de la base de l'espace des valeurs propres, ce qui conduit à linéariser le système en introduisant de nouvelles variables :

Nous obtenons ainsi un système d'équation linéaire, sous forme d'un problème aux valeurs propres *Z*, contenant deux fois plus d'équations que le système original :

où C_1 et C_2 , sont deux matrices de dimension (4 x 4), tandis que \vec{g} est un vecteur défini par :

$$\vec{g} = \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \\ \vec{v} \end{pmatrix}$$

Les deux matrices C_1 et C_2 sont obtenues en remplaçant dans les équations du mouvements les quantités $\{\frac{\vec{u}_1}{Z}, \frac{\vec{u}_2}{Z}\}$ par $\{\stackrel{*}{v_3}, \stackrel{*}{v_4}\}$ respectivement. Par suite, nous réécrirons chaque équation sous la forme (IV. 10), puis par identification, nous arrivons aux formes explicites des matrices C_1 et C_2 . Ainsi dans notre cas, nous obtenons les matrices suivantes après augmentation de la base :

En résolvant numériquement les systèmes d'équations formés par les matrices $\{C_1, C_2\}$, nous trouverons pour chaque énergie Ω , deux valeurs propres, ainsi que leurs vecteurs propres correspondants. Les solutions physiquement acceptables, associées au caractère propageant ou évanescent des modes propres sont ceux qui répondent à l'inégalité suivante :

$$Z_{\nu} \leq 1$$
 (III, 12)

La figures (III. 4) e donnent l'allure du module des facteurs de phase en fonction de l'énergie Ω ..



Figure. III.4

On remarque que le facteur de phase est propageant sur la plage de l'énergie incidente de [0,2] et évanescent de 2 à l'infini.

III.2.5 Courbes de dispersion à 3D

Pour avoir une vision complète des relations de dispersion comprenant aussi bien les modes propageants ($|Z_v| = 1$), que les modes atténués ($|Z_v| < 1$), il est intéressant de représenter sur un graphe à trois dimensions les trajectoires parcourues dans le plan complexe par les facteurs de phase Z_v en fonction de l'énergie Ω . Les figures (III. 5) e, présentent de telles courbes caractérisant le guide d'ondes parfaits

Les figures (III. 5), conduisent à une réinterprétation des figures (III. 2) de Ω (q) et une meilleure compréhension de ce qui se passe réellement. En fait le principal avantage de ces courbes est de visualiser aussi bien les modes propageants, que les modes évanescents. D'ailleurs comme on le voit sur les figures (III. 5), les solutions donnant les modes propageants c'est-à-dire dont le module de Z_{ν} est égal à 1, se rapportent toujours aux courbes qui suivent un cercle de rayon unité, d'équation : $|Real(Z_{\nu})|^2 + |Imag(Z_{\nu})|^2 = 1$. En revanche, les solutions évanescentes, dont le module de Z_{ν} est inférieur à 1, correspondent toujours aux courbes contenues à l'intérieur de ce cercle unité.



Fig.III.5 : *Représentation à trois dimensions de la courbe de dispersion dans le guide d'ondes parfaits .*

III.3 Etats de magnons localisés au voisinage du défaut magnétique

L'objectif de ce paragraphe est de développer une approche théorique afin d'étudier les états localisés de magnons induit par la présence de l'impureté magnétique. Cette théorie utilise essentiellement la méthode de raccordement, introduite initialement pour l'étude des phénomènes vibrationnels.^{35,59,60,73} Ensuite, à partir de 1994, la méthode à été appliquée et adaptée par certaines auteurs^{22,31-34} à l'étude des modes de magnons localisés en surface des structures magnétiques.

III.3.1 Matrice dynamique du système

Le système pour le quel nous allons calculé les états de magnons localisés, est présenté sur la figure (III. 6) ci-dessous :



Fig.III.6 : *Visualisation des régions de défaut ; de raccordement ; et de volume, utilisées pour l'étude des phénomènes de localisation et diffusion d'ondes de spin.*

La matrice dynamique M_d , trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement de précession des vecteurs de spin situés dans la zone grisée sur la figure (III. 6), et de ceux appartenant aux colonnes n = -1 et n = 1. Cette région d'étude est choisie de telle sorte qu'elle comprenne aussi bien les spins de la région du défaut, ainsi que ceux des deux régions de raccordement présentant un environnement du volume.

Les équations du mouvement de précession des vecteurs de spins situés sur les sites de coordonnées : (0), (1), (-1), sont données respectivement comme suit :

L'ensemble de ces équations constitue un système linéaire homogène. Celui-ci, peut se mettre sous forme d'une matrice rectangulaire M_d , contenant plus d'inconnus que d'équations telle que :

avec :

$$M_{d} = \begin{bmatrix} d_{1}, d_{2}, d_{3}, 0, 0 \\ d_{2}, d_{4}, 0, d_{2}, 0 \\ d_{2}, 0, d_{4}, 0, d_{4} \end{bmatrix}$$

et :

$$\begin{cases}
 d_1 = m^* y^2 - 2^* r_{1d} \\
 d_2 = r_{1d} \\
 d_2 = r_{1d} \\
 d_4 = y^2 - 2^* r_{1d} - r_1
\end{cases}$$

La quantité $|u\rangle$ dans l'équation (III, 22), représente un vecteur décrivant toutes les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la zone perturbée.

III.3.2 Matrice de raccordement

Le principal bute de cette partie, dans le cadre de notre étude est d'établir les relations de raccordements entre les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant au domaine de l'interface magnétique et le champ de précession des modes évanescents en volume aussi bien pour le film *A* que pour le film *B*.

La connaissance simultanée des facteurs de phase $[Z_A, 1/Z_A]$ et $[Z_B, 1/Z_B]$, caractérisant les modes évanescents dus au défaut, déterminés à partir des matrices dynamiques en volume dans les deux films A et B, nous permet de définir la matrice de raccordement. Pour cela nous allons représenter les amplitudes de précessions des vecteurs de spin situés aux sites de la région de raccordement, par une combinaison linéaire de vecteurs $\{RT\}$, définissant un espace fini. Dans le cas présent, on est en présence de deux régions de raccordement différentes, c'est pour cela que nous allons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$, la première caractérise la (**RRG**) et la seconde caractérise la (**RRD**). Les dimensions des vecteurs unitaires $\{R\}$ et $\{T\}$ sont liés au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude préliminaire en volume, Ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension 1.

Les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenants à la (**RRG**), peuvent êtres alors décrites de la manière suivante :

de même, pour les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenants à la (**RRD**), elles peuvent êtres décrites par :

$$u_{B\alpha}(n,s,m) = \sum_{\nu'=1}^{1} [Z_B(\nu')]^n . T. p_B(\alpha,\nu') \text{ pour } n>1$$
 (III, 15)

ici α , représente une des deux directions cartésiennes et $p(\alpha, \nu)$, $p(\alpha, \nu')$ sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents. Ils sont déterminés à l'aide des vecteurs propres des matrices dynamiques en volume M_{dA} et M_{dB} définies auparavant.

Le vecteur $|u\rangle$, décrivant les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la maille élémentaire de la zone du défaut (voir Fig. III.6), peut se décomposer en deux parties : la première est notée par $|irr\rangle$, elle est constituée par les amplitudes de précessions de vecteur de spin irréductibles formant la région du défaut. Quand à la seconde notée par $|rac\rangle$, elle est formée par les amplitudes de précessions associées aux deux vecteurs de spin raccordés, ceci pour les deux bases $|R\rangle$ et $|T\rangle$. Ainsi on écrit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix}$$
 (III, 16)

avec :

$$dim |irr\rangle = (1 \times 1)$$
$$dim |rac\rangle = (2 \times 1)$$

A partir de là, le raccordement des spins peut être décrit à l'aide des expressions suivantes :

où I_d est une matrice identité de dimension (1×1) ; et R_1, R_2 , sont des matrices (1×1) données par :

$$R_{1} = \begin{bmatrix} Z_{A}(1)p_{A}(1,1) & Z_{A}(2)p_{A}(1,2) \\ Z_{A}(1)p_{A}(2,1) & Z_{A}(2)p_{A}(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_{2} = \begin{bmatrix} Z_{A}^{2}(1)p_{A}(1,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(1,2) \\ Z_{A}^{2}(1)p_{A}(2,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_{3} = \begin{bmatrix} Z_{A}^{2}(1)p_{A}(1,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(1,2) \\ Z_{A}^{2}(1)p_{A}(2,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(2,2) \end{bmatrix}$$
$$R_{4} = \begin{bmatrix} Z_{A}^{2}(1)p_{A}(1,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(1,2) \\ Z_{A}^{2}(1)p_{A}(2,1) & Z_{A}^{2}(2)p_{A}(2,2) \end{bmatrix}$$

En posant
$$M_R = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix}$$
, le système d'équation (III. 26) peut s'exprimer à

l'aide de la matrice de raccordement M_R comme suit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = M_R \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} \qquad \dots \dots \dots \dots (\text{III, 18})$$

avec :

$$dim [M_R] = (5 \times 3)$$

En utilisant la relation (III, 27), on peut réécrire le système (III, 22) de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} M_d (3 \times 5) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_R (5 \times 3) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \qquad \dots \dots \dots \dots (\text{III, 19})$$

soit;
$$\begin{bmatrix} M_s(3\times3) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \qquad \dots \dots \dots (III, 20)$$

si M_s est le produit matriciel des deux matrices M_d et M_R :

Pour des valeurs de r_1 *et* r_{1d} données, les modes propres de magnons localisés au voisinage défaut magnétique sont déterminés à l'aide de la relation de compatibilité suivante :

III.4 Densité d'états de magnons

III.4.1 Méthode de calcul

Beaucoup de propriétés physiques intéressantes induites par les excitations élastiques et magnétiques, sont obtenues à travers un calcul de densité d'état $D(\Omega)$,⁷⁴ définie d'une manière que la quantité $D(\Omega)d\Omega$ soit le nombre d'états d'énergies compris entre Ω et $(\Omega+d\Omega)$. Dans la limite thermodynamique, $D(\Omega)$ est considérée comme étant une fonction continue.

Nous pouvons faire un calcul de densité d'états de magnons au voisinage du défaut magnétique en utilisant un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de Green et la méthode de raccordement.^{46,75-77} Pour cela il faut tout d'abord calculer la densité spectrale. Le moyen le plus direct pour avoir cette dernière est d'utiliser l'opérateur de Green, qui peut être exprimé d'une manière très compacte en utilisant la méthode de raccordement,^{75,78} sous la forme suivante :

La matrice des densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la direction de l'interface magnétique est alors donnée par la relation suivante :

où p et p ' représentent deux spins différents, α et β deux différentes directions cartésiennes, et $L^{p}_{\alpha m}$ la composante α du vecteur amplitude de précession du vecteur de spin p, pour la branche d'énergie Ω_{m} . La densité d'états qui correspond à la somme sur φ_y de la trace des matrices de densités spectrales peut alors s'écrire ainsi :

$$D(\Omega) = \sum_{\varphi_{y}} \sum_{p\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{(p,p)}(\varphi_{y},\Omega) = -\frac{2\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_{y}} \sum_{p\alpha} \lim_{\varepsilon \to 0^{+}} \left[\operatorname{Im} G_{\alpha\alpha}^{pp}(\varphi_{y},\Omega+i\varepsilon) \right] \quad \dots \dots \dots (\text{III}, 24)$$

III.4.2 Résultats et discussion

Les figures (III. 7), (III. 8) et (III. 9) présentent les densités d'états correspondantes aux trois spins situés sur les sites (-1), (0) et (1), constituant une maille élémentaire de la région du défaut. Notons que le calcul de ces densités d'états est déterminé en fonction des paramètres du système perturbé et de l'énergie incidente.









Figure.III.9

III.5 Étude de la diffusion

L'étude du phénomène de diffusion d'ondes de spin dans les systèmes magnétiques désordonnés de basses dimensions, est devenue un domaine de recherche en plaine développement à l'heure actuelle.²² Cela est due essentiellement à l'apparition de nouvelles techniques de fabrication d'objets magnétiques de taille sub-microscopiques, de nouveaux concepts théoriques permettant la formulation de ce phénomène sous forme mathématiques ainsi qu'aux moyens de calculs plus efficace, permettant de faire des simulations numériques aboutissant à des résultats qui sont en accord avec l'expérimentation.

Dans cette partie nous allons voir comment une impureté magnétique, diffuse-t-elle les ondes de spins de volume. Pour cela nous avons utilisé la méthode de raccordement, développée initialement pour l'étude du phénomène de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes désordonnés. Le principe de cette méthode appliqué à l'étude de ce phénomène dans le cas des magnons, a été illustré au chapitre III.

Comme on a déjà vue au chapitre III, l'étude du phénomène de diffusion se ramène généralement à la résolution du système d'équations donné par la relation (III. 13). Pour résoudre un tel système, il nous manque évidemment que le vecteur incident $|IH\rangle$ à trouver par l'intermédiaire des équations (III. 5) et (III. 6), car les matrices M_d et M_R sont déjà calculées aux paragraphes précédents. Par identification, on trouve un vecteur colonne $|IH\rangle$ de dimension (5x1), dont les composantes s'écrivent comme suit :

$$|IH\rangle = \left[0, 0, \frac{p_A(1,1)}{Z_A(1)}, 0, \frac{p_A(2,1)}{Z_A(1)}\right]^{t}$$
 (III, 25)

si le mode incident est le mode v = 1

où $p_A(1,1)$, $p_A(2,1)$ sont les composantes des deux vecteurs propres associés au mode v = 1 et $Z_A(1)$ est le facteur de phase correspondant.

Après avoir obtenu tous les termes de l'équation (III. 13), on passe directement à la résolution numérique de ce système. Ce qui permet d'avoir les quantités $|R\rangle$ et $|T\rangle$, qui sont à

leurs tour utilisées pour la détermination de toutes les grandeurs physiques intéressantes telles que les coefficients de transmission et de réflexion ainsi que la conductance magnonique .

III.5.1 Coefficients de transmissions et de réflexions

La figure (III.10) présente les courbes de transmission et de réflexion en fonction de l'énergie de diffusion Ω obtenues pour une variété de paramètres du système. Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine d'existence de la plage de propagation, là où les vitesses de groupe sont non nulles.



Figure.III.10

Nous constatons sur la figures (III.10), que le coefficient de transmission diminue jusqu' à s'annuler à la frontière de la zone de Brillouin par contre le coefficient de réflexion augmente et atteint le maximum au frontière de zone de Brillouin. Ce résultat obtenue est conforme à l'intuition ; car nous pouvons pensé que les ondes de spin de basses énergies n'ont pas l'énergie suffisante pour franchir le défaut.

IV.5.2 Conductance magnonique

Les figures (III. 11) donne l'allure de la conductance magnonique du système perturbé par une défaut ponctuel en fonction de l'énergie de diffusion Ω pour les paramètres du système considérés. Cette conductance qui est définie comme étant la somme des coefficients de transmission sur tous les modes propageants, est très sensible aux différents paramètres du système. Elle est reliée à la conductivité thermique du système qui est une grandeur mesurable.



Figure.III.11

CONCLUSION

L'intérêt scientifique porté à la connaissance des propriétés des systèmes de basse dimension, nous a motivé à développer une approche théorique et de simulation numérique permettant le traitement des phénomènes de localisation et de diffusion d'ondes de spin dans des structures *magnétiques mésoscopiques désordonnées*. Cette approche est basée essentiellement sur une méthode connue sous le non *« méthode de raccordement »*, adaptée initialement pour l'étude des phénomènes vibrationnels.

Le développement de cette théorie nous a permis, à partir d'un Hamiltonien d'Heisenberg simple décrivant toutes les interactions premiers voisins en absence de champ magnétique total, de mettre en évidence l'influence de certains défauts magnétiques (défaut ponctuel, interface et marche magnétique) sur les propriétés de localisation et de diffusion d'ondes de spin dans des guides d'onde ferromagnétique quasi-bidimensionnels. Dans un premier temps, nous avons effectué un calcul des propriétés dynamiques dans les guides d'ondes parfaits (loin des défauts). Ensuit, en utilisant la méthode de raccordement, et à travers des simulations numériques, nous avons fait aux voisinages des défauts le calcul des densités d'états des spins formant les zones perturbées et enfin un calcul des grandeurs physiques de diffusion.

Pour les densités d'états de magnons des spins formant les régions de défaut, les résultats ont montrés l'apparition de plusieurs pics à des énergies bien déterminées. Certains d'entres eux, sont associées aux différents états de magnons localisés qui apparaissent au voisinage des défauts considérés. Tandis que d'autres, sont des pics de résonances, dues à des interactions du type *Fano*. Ces dernières sont une signature d'un couplage interférentiel entre des modes propageants et des modes discrets créés par la présence des défauts.

En ce qui concerne l'étude de la diffusion, les structures les plus remarquables dans les courbes de transmission et de réflexion obtenues, ont la forme de résonances dite de *Fano*. Par ailleurs un calcul de la conductance magnonique du défaut considéré, a montré que celle-ci se trouve fortement influencée par les différents paramètres du système. Comme perspective, nous comptons tout d'abord de développer la méthode de raccordement afin quelle soit appliquée à des systèmes plus étendus en introduisant des défauts à deux, voir trois dimensions. D'autre par, il serait intéressant de reprendre les études que nous avons fait en utilisant un traitement purement quantique et de prendre en considération certaines paramètres que nous avons négligé, comme le champ magnétique appliqué, le champ d'anisotropie ainsi que l'interaction d'échange que nous avons limité au plus proches voisins. Enfin nous comptons aussi de calculer d'autres grandeurs physiques intéressantes, telles que: la chaleur spécifiques des magnons ; la variation relative de l'aimantation ... etc.

LISTE DES REFERENCES

- B. L. Johnson, Jerome T. Weiler, R. E. Camley. Physical Review B, Vol. **32**, No.10 (1985).
- 2. E. F. Sarmento and T. Kaneyoshi. Physical Review B, Vol. 40, No. 4 (1989).
- 3. A. Moutiea and M. Kerouad. M. J. Condensed Matter. Vol. 4, No. 1 (2001).
- 4. B. Lazarovits, L. Szunyogh, and P. Weinberger. Phys. Rev B. Vol.67. 024415 (2003).
- 5. R. V. Leite and R. N. Costa Filho. Cond-Mat / 0008223 V1 (2000).
- 6. A. Khater and M. Abou. Ghantous. Surf. Sci. Lett. 498, L97 (2002).
- K. Xia, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, I. Turek, J. Kudrnovsky and V. Drchal. Physical. Review B, 63, 064407 (2001).
- K. M. Schep, J. B. A. N. Van Hoof, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, J. E. Inglesfield. Journal Of Magnetism and Magnetic Materials 177-181 (1998) 1166-1167.
- 9. Hyunbum Jang and Malcolm J. Grimson. J. Phys. Condens. Matter 10, 9641-9654.(1998).
- Zheng Gai, G. A. Farnan, J. P. Pierce, and J. Shen.
 Appl. Phys. Lett. Vol. 81, No. 4, 742-744. (2002).
- Z. K. Wang, M. H. Kuok, S. C. Ng, D. J. Lockwood, M. G. Cottam,
 K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, and U. Gösele. Phys. Rev. Lett. Vol. 89. No. 2 (2002).
- Y. B. Xu, M. Tselepi, J. Wu, S. Wang, J. A. C. Bland, Y. Huttel, and G. Van Der Laan. IEEE Transactions On Magnetics, Vol. 8, No. 5, 2652-2654.(2002).
- L. Diekhöner, M. A. Schneider, A. N. Baranov, V. S. Stepanyuk, P. Bruno, and K. Kern. Phys. Rev. Lett. Vol. 90. No. 23 (2003).
- 14. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern and C. Carbone. Nature 416, 301 (2002).
- J. A. C. Bland, S. Hope, B. Choi, and P. Bode.
 Journal Of Applied Physics. Vol. 85, No. 8. (1999).
- 16. R. L. Stamps and R. E. Camley, R. J. Hicken. Phys Rev B. Vol. 54. No. 6. (1996).
- D. Zhao, Feng Liu, D.L. Huber, and M. G. Lagally. Journal Of Applied Physics. 91, 5 (2002).
- S. P. Li, M. Natali, A. Lebib, A. Pépin, Y. Chen, Y. B. Xu. Journal Of Magnetism and Magnetic Materials 241, 447-452 (2002).
- 19. R. Robles, J. Izquierdo, A.Vega, Phys. Rev. B61, 6848(2000).
- 20. B.A. Ivanov, V.M.Muravyov, D.D.Sheka

Journal of Experimental and Theoretical Physics 89, 58 (1999)

- Denis D. Sheka, Boris A. Ivanov, and Franz G. Mertens, Phys. Rev. B64, 0242 (2001)
- 22. M. Abou. Ghantous and A. Khater. Eur. Phys. J. B 12, 335-341 (1999).
- 23. B. Lazarovits, L. Szunyogh, and P. Weinberger. Physical. ReviewB.Vol.**69**,104441. (2002).
- 24. A. T. Costa, Jr. R. B. Muniz. D. L. Mills. Physical. Review B. 69, 06441. (2004).
- R. L. Stamps, R. E. Camley, B. Hillebrands, and G. Güntherodt. Physical. Review B. Vol. 46. No 17. (1992).
- S. Rusponi, T. Cren, N. Weiss, M. Epple, P. Buluschek, L. Claude and H. Brune. Nature Materials. 2, 546-551 (2003).
- F. D'Orazio, F. Lucari, G. Carlotti, G. Gubbiotti, M. Carbucicchio, G Ruggiero..
 Journal Of Magnetism and Magnetic Materials, 226-230, 1767-1769(2001).
- 28. R. E. De Wames and T. Wolfram. Phy. Rev. Vol.185, No.2 (1969).
- 29. M. F. Thorpe. Physical Review B. Vol. 2, No. 7 (1970).
- 30. E. Ilisca et E. Gallais. Le Journal de Physique. Tome 35. No. 10. 812-824 (1972)
- 31. Niu-Niu Chen and M.G.Cottam.Solid. State. Communications, Vol 76, No 3, pp. 437-442, (1990).
- 32. M. Belhadi, A. Khater, Surface Review and Letters, Vol. 11, No. 1 99-109 (2004).
- 33. R. Lai, S. A. Kiselev, and A. J. Sievers. Physical Review B. Vol. 56, No. 9 (1997).
- 34. P. Böni, B. Roessli, D. Görlitz and J. Kötzler.Physical Review B. Vol. 65, 144434 (2002).
- 35. J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C : Solide state Phys. 20, 4725 (1987).
- 36. Y. Pennec, A. Khater, Surf. Sci. 348, 82 (1995).
- A. Virlouvet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec, K. Maschke, J. Phys. Cond. Matter. 8, 7589 (1996).
- 38. A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet, A. Khater Phys. Rev B. Vol.55. No 3, 1707 (1997).
- 39. S. Irene. Mémoire de Magister, à L'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. (2001)
- 40. José-Philippe Pérez. Robert Carles. Robert Fleckinger. Electromagnétisme Fondements et Applications.
- 41. Max. Brousseau. Physique du solide (propriétés électroniques).
- 42. Charles. Kittel. Introduction à la physique de l'état solide.
- 43. René. Pauthenet. Théorie du Magnétisme. "Technique de l'ingénieur".

- 44. Pavlov et A. Khokhlov. Physique du Solide.
- 45. M. Born and T. Von Karman, Z. Physik 13, 297 (1912).
- 46. Niu-Niu Chen and M. G. Cottam Phy. Rev B. Vol 44, 14 (1991).
- 47. H. Puszkarski. Phys. stat. Solid. (b). 171, 205 (1992).
- 48. Niu-Niu Chen and M. G. Cottam J. Appl. Phys. 67 (9) (1990).
- 49. Shan-Ho Tsai and D. P. Landau. Cond-Mat / 0302397 v1 (2003).
- Svetlana V. Rakhmanova and Andrei V. Shchegrov. Physical. Review B. Vol. 57. No 22. (1998).
- 51. S. Flach and Y. Zolotaryuk. Solid state Phys. 41, 315-327 (2001).
- 52. R. L. Stamps and R. E. Camley. R. J. Hicken. J. Appl. Phys. 81 (8) (1997).
- 53. G. I. Stegemann and F. Nizolli, Surface Excitation, ed. V. M. Agronovich and R. Loudon (Amsterdam: North Holland) (1984).
- 54. R. E. Allen, G. P.Alldrege and F. W. De Wette, phys. Rev. B. 4, 1648 (1971).
- 55. I. M. Lifshtz and L. N. Rosenzweig, Zh. Ekerim. i Teor. Fiz., 18, 1012 (1948).
- 56. D. L. Mills, J. Phys. Chem. Solids 28, 2245 (1967).
- 57. Filipov. Sov. Physics Solid State 9, 1048 (1967).
- 58. M. G. Cottam, J. Phys. C: Solide State Phys. 11, (1978).
- 59. T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. Vol. 155, 3 (1967).
- 60. J. Szeftel, A. Khater ,F, Mila ,S.d'Addato and N. Auby,J. Phys.C : Solide state Phys.21, 2113 (1988).
- 61. A. Khater. N. Auby, R. F. Wallis, surface sci. 217, 563 (1989).
- 62. A. Khater and H. Grimech, surface sci . 251, 381 (1991).
- 63. L. Udvardi, L. Szunyogh, K. Palotas and P. Weinberger. Physical Review B **68**, 104436 (2003).
- 64. A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 11, 563(1978).
- 65. A. Khater, O. Rafil, Y. Labaye, Y. Pennec, Solid State Communications. Vol. 87. No. 1, 53 (1993).
- 66. M. Belhadi, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy, R. Tigrine Phys. Stat. Sol. (b) 228, 685-693 (2001).
- 67. Alexandre. Fellay. Travail. Pratique de Diplôme D'ingenieur Physicien. Ecole Polytechnique Fédérale de Lausane. Octobre (1995).
- M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A. Virlouvet and K. Maschke, Eur. Phys. J. B 15, 435-443 (2000).

- 69. M. Belhadi. Thèse de Doctorat D'état
 - à L'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. (2000)
- 70. R.Landauer, J.Phys: Condens.Matter 1, 8099(1989)
- 71. Ipatova (I. P.), Klochikhin (A. A.), Maradudin (A.A.), Wallis (R. F.), Proceeding of the Conference on Localized Excitations.
- 72. Wallis (R. F.), Maradudin (A.A.), Solid State Co, 5, 89 (1967)
- 73. J. Szeftel, and S. Lehwald. Surf sci: 143,11 (1984)
- 74. E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, Physical. Review B. Vol. 32, No. 7 (1985).
- 75. H. Grimech. and A. Khater, Surf. Sci. 323 198 (1995).
- 76. M. Eisenbach, B. L. Gyorffy, G. M. Stocks, B. Ujfalussy, Phys. Rev. B65, 144424 (2002).
- 77. J. B. Salzberg, L. M. Falicov. Physical. Review B. Vol. 15, No. 11 (1977).
- 78. H. Grimech et A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995).
- 79. C. Weisbuch and .G. Vinter, Quantum Semiconductors Structures (Academic, Boston).
- C. Weisbuch, S. Beaumont, C. Sotomayor-Torrès, J. P. Kotthaus, K. Harmans, P. Van Daele and F. Briones, la recherche 237, 22, 1298 (1991).
- L. Albini, G. Carlotti, G. Gubbiotti, S. Loreti, C. Minarini, L. Palieri, S. R. Teixeira. Physica B, 275, 253-257 (2000).
- 82. L. H. M. Barbosa, R. B. Muniz, A. T. Costa Jr, and J. Mathon. Cond-Mat / 0010215 v1 (2000).
- D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars and P. M. Petroff, Appl.Phys. Lett. 63, 3203 (1993).
- K. Nötzel, N. Ledentsov, L. Däweritz, M. Hohenstein and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. 67, 3812 (1991).
- 85. H. Brune, M. Giovannini, K. Bromann and K. Kern, Nature 394, 451 (1998).
- 86. R. Feynman, Engineering and Science, Février 22, (1960).

ANNEXE 1

QUANTIFICATION DES ONDES DE SPIN

Les excitations élémentaires d'un système de spins ont une forme ondulatoire et sont appelées ondes de spins. Elles sont analogues aux ondes vibrationnelles ou phonons. Les ondes de spins sont des oscillations de l'orientation relative des spins d'un réseau de spins tandis que, les vibrations du réseau sont des oscillations des positions relatives des atomes dans le réseau cristallin.

Sachant que les ondes vibrationnelles d'un réseau cristallin sont quantifiées et leurs quantum de quantification est appelé phonon, nous allons essayer de mettre en évidence la quantification des ondes de spin d'un réseau de spins. Pour cela considérons un système ferromagnétique à N spins S. Son état fondamental correspond à un état d'ordre où tous les spins sont parallèles entre eux, ce qui fait que le nombre quantique de spin total a la valeur NS.

L'excitation d'une onde de spins a pour effet d'abaisser le spin total, car les spins ne sont plus parallèle comme auparavant à l'état fondamental. Nous allons chercher la relation entre l'amplitude de l'onde de spins et la réduction de la composante suivant z du nombre quantique de spin total. Pour ce faire, considérons l'onde de spin (I, 24) présentée au chapitre I avec v=-iu. Cela nous permet d'écrire les équations (I, 24-a,b) sous la forme :

$$S_{p}^{x} = u e^{i(pka-\omega t)}; \quad S_{p}^{y} = -iu e^{i(pka-\omega t)}$$
(A1.1)

La composante du spin perpendiculaire à la direction z indépendamment de la position p et du temps t est u. A partir de la figure (A1.1), la composante z d'un vecteur de spin S est donnée par la relation :

$$S^{z} = (S^{2} - u^{2})^{\frac{1}{2}}$$
 ou bien $S^{z} = S \cdot \left(1 - \frac{u^{2}}{S^{2}}\right)^{\frac{1}{2}}$ (A1.2)

Annexe 1

Pour de faibles amplitudes de précession, c'est-à-dire pour $\frac{u}{S} \ll 1$, nous écrivons S^z sous la forme suivante :

$$S^{z} = S - \frac{u^{2}}{2S}$$
(A1. 3)

Comme *N* est le nombre total de spins *S* et *NS* - n_k la composante suivant *z* du spin total quand une onde de spin *k* est excitée, alors d'après (A1. 3), nous obtenons la condition de quantification de l'amplitude u_k de l'onde de spin :

$$n_k = N \frac{u_k^2}{2S}$$
; soit $u_k^2 \approx 2S \frac{n_k}{N}$ (A1.4)

où n_k est un entier donnant le nombre de magnons de vecteur d'onde k qui sont excité. Chaque magnon fait diminuer d'unité la composante suivant z du spin total.



Fig.A1.1: Projection du vecteur spin S sur l'axe de quantification z. u est la composante du spin perpendiculaire à la direction z indépendamment de la position p et du temps t.

Après avoir met en évidence la quantification des ondes de spin, il nous reste maintenant à savoir est ce que l'énergie ε_k satisfait à la même condition de quantification :

que pour les photons et les phonons ?

L'énergie d'échange d'un système de spins donnée par l'équation :

$$E_{e} = -2J \sum_{p=1}^{n} \vec{S}_{p} \cdot \vec{S}_{p+1}$$
(A1. 6)

dépend du cosinus de l'angle entre les spins de sites p et p+1. D'après la relation (A1. 4), la différence de phase au temps t entre deux spins successifs est de ka radians. Comme on voit sur la figure (A1.2), les extrémités des deux vecteurs de spin sont séparés par une distance $2u\sin(\frac{1}{2}ka)$. L'angle φ entre les vecteurs de spin est alors donnée par :

Pour de faibles amplitudes de précession c'est-à-dire pour $\frac{u}{S} \ll 1$ le cosinus de l'angle φ peut s'écrire ainsi :

$$\cos(\varphi) = 1 - 2 \cdot \left(\frac{u}{S}\right)^2 \cdot \sin^2(\frac{1}{2}ka)$$
 (A1. 8)

cela nous permet d'écrire l'équation (A1. 6) sous la forme:

$$E_e = -2JNS^2 + 2JNu^2 \cdot \sin^2(\frac{1}{2}ka)$$
$$\Rightarrow \quad E_e = -2JNS^2 + 2JNu^2 \cdot [1 - \cos(ka)]$$

L'énergie d'excitation d'une onde de spin d'amplitude u_k et de vecteur d'onde k est alors donnée par :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{k} = 2JN \, u_{k}^{2} \cdot [1 - \cos(ka)]$$
(A1. 9)

En utilisant la condition de quantification (A1. 4), nous obtenons un résultat ayant la forme (A1. 5) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{k} = 4JS.[1 - \cos(ka)]_{n_{k}}$$
; soit $\boldsymbol{\varepsilon}_{k} = n_{k}\hbar\boldsymbol{\omega}_{k}$ (A1. 10)

car :

Par conséquence l'énergie de magnons satisfait à la même condition de quantification des photons et des phonons.



Fig.A1.2 : Construction reliant l'angle φ entre deux vecteurs de spin successifs à l'amplitude u de l'onde de spin et à l'angle de phase ka. La longueur de la ligne reliant les extrémités des deux vecteurs de spin est $2u\sin(\frac{1}{2}ka)$; si la longueur d'un spin est S alors : $S\sin(\frac{1}{2}\varphi) = u\sin(\frac{1}{2}ka)$.

ANNEXE 2

CALCUL DE LA VITESSE DE GROUPE D'UNE ONDE DE SPIN

Par définition, la vitesse de groupe d'un paquet d'onde est la vitesse à laquelle est transportée l'énergie ou l'information dans un milieu donné. Elle est définie pour des vecteurs d'ondes q réels par l'expression suivante :

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q}$$
; soit $\overrightarrow{V_g} = \overrightarrow{grad}_q \Omega(\overrightarrow{q})$ (A2.1)

dans le cas où le vecteur d'onde q est différent d'un réel, nous imposons à la vitesse de groupe une valeur nulle.

Pour déterminer cette vitesse groupe deux méthodes différentes peuvent être utilisées : la méthode des différences finies et la méthode des perturbations ; toutes deux exigent la résolution du problème du guide d'onde parfait dans le sens :

1-calcul par la méthode des différences finies

Pour calculer la dérivé $\frac{\partial \Omega}{\partial q}$, on peut appliquer les routines standard existantes, basées sur un schéma "différences finies" plus ou moins compliqué. Cette méthode profite du fichier contenant les relations de dispersion calculées pour plusieurs valeurs de q comprises entre 0 et π . Ce fichier est indispensable puisqu'il permet de relier les couples ($\Omega(q)$, Z) à la bonne courbe de dispersion. A partir de là, la vitesse de groupe est simplement définie comme étant la pente de la tangente à cette courbe de dispersion. On écrit ainsi :

$$V_g = \frac{\Delta \Omega}{\Delta q} = \frac{\Omega_{i+1} - \Omega_i}{q_{i+1} - q_i}$$
(A2.3)

2-calcul par la méthode des perturbations

Cette nouvelle approche [F. Gagel and K. Maschke, Phys. Rev, **B52**, 2013 (1995)] dite méthode des perturbations, consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation (A2. 2) et l'équation de Schrödinger stationnaire $H\Psi=E\Psi$, portant sur le traitement des perturbations indépendantes du temps en mécanique quantique.

Supposons tout d'abord connues tous les éléments de l'équation :

$$M_{d}(\vec{q}_{0}).\vec{u}(\vec{q}_{0}) = -\Omega(\vec{q}_{0}).\vec{u}(\vec{q}_{0}) \qquad (A2.4)$$

le rôle de la perturbation est joué par un accroissement infinitésimal $\Delta \vec{q}$ tel que:

si l'on se limite au premier ordre, nous pouvons considérer que le vecteur propre u(q) est constant et on écrit ainsi :

$$\vec{u}(\vec{q}) = \vec{u}(\vec{q}_0)$$
(A2. 6)

par contre :

et

$$\Omega(\vec{q}) = \Omega(\vec{q}_0) + \Delta \vec{q} \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial \vec{q}} \qquad (A2. 7-b)$$

En tenant compte de ces approximations, nous pouvons réécrire l'équation (A2. 2) à la manière suivante :

où \boldsymbol{u}^t est le vecteur transposé du vecteur propre \boldsymbol{u}

Cette nouvelle forme de l'équation (A2. 2), donne la relation entre la dérivé de la matrice dynamique M_d et celle de Ω . La vitesse de groupe est ainsi exprimée par :