

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Ahmed Draia Adrar

Faculté des Sciences de la Matière, Mathématiques et Informatique

Département des Sciences de la Matière

THESE

En vue de l'obtention du Diplôme de Doctorat en Physique

Spécialité : Physique des Matériaux



Présentée Par

Bouchareb Sansabilla

Propriétés dynamiques, magnétiques et électroniques des couches minces et systèmes de basse dimension avec des défauts structuraux ou implantés

Soutenue publiquement le: 03/06/ 2024 devant le jury composé de :

Mr. BOUSSAID Mohammed	MCA	Univ. Adrar	Président
Mr. TIGRINE Rachid	Pr	Univ. Adrar	Encadreur
Mme. FETAH Sabah	Pr	Univ. M'Sila	Co-Encadrice
Mr. SAHOUANE Nordine	Directeur de recherche	U.R.E.R.M.S. Adrar	Examineur
Mr. SAKHER Elfahem	MCA	Univ. Adrar	Examineur
Mr. BOUSSOUKAIA Tahar	MCA	Univ. Adrar	Examineur

Année universitaire : 2023/2024

الإهداء

من دواعي سروري أن أهدي عملي

هذا الى المكتبة المركزية لجامعة أحمد

درايعية واتمنى من الله ان يجعل هذا

العمل اضافة علمية .





Remerciements

*Je souhaite exprimer ma reconnaissance envers tous ceux qui m'ont apporté leur aide pour finaliser mon projet de thèse. Je souhaite tout d'abord exprimer ma reconnaissance envers mon professeur superviseur, le professeur **Tigrine Rachid**, ainsi que mon professeur assistant superviseur, le professeur **Fetah Sabah**, pour leur expertise, leur soutien et leurs enseignements précieux tout au long de mon parcours universitaire.*

Je souhaite exprimer ma reconnaissance envers les membres du jury pour leur privilège d'avoir étudié ce travail de thèse.

*Je souhaite exprimer ma reconnaissance envers **Monsieur Boussaid Mohammed** d'avoir accepté de diriger ce jury de thèse. Je souhaite exprimer ma reconnaissance envers les membres du jury de cette thèse, **Monsieur Sahouane Nordine**, **Monsieur Sakher Elfahem** et **Monsieur Boussoukaia Tahar**, pour leur contribution précieuse.*

En outre, je ne fais pas abstraction de mes frères et sœurs qui m'ont toujours soutenu et partagé mes moments de bonheur et de tristesse. Leur soutien constant revêt une grande importance pour mon succès scolaire. Pour conclure, je souhaite exprimer ma reconnaissance envers toutes les personnes qui m'ont apporté leur aide, que ce soit de près ou de loin.

De plus, je souhaite exprimer ma reconnaissance envers mes parents, ma chère mère et mon père, dont le soutien constant et les encouragements infaillibles ont été une véritable source de motivation. L'amour et les sacrifices qu'ils ont faits sont les bases sur lesquelles j'ai pu bâtir mon parcours éducatif.



Sommaire

Introduction générale.....	2
----------------------------	---

Chapitre I- Introduction à l'étude de surface et interface

I.1. Introduction.....	7
I.2. Importance de l'étude des surfaces.....	7
I.2.1.Surface microscopique.....	7
I.2.2.Rappel sur la cristallographie	8
I.2.2.1.Structure cristalline.....	8
I.2.2.2.Réseau de Bravais bidimensionnel.....	9
I.2.2.3.L'effet de surface.....	10
I.2.2.4.structures de surface.....	11
I.2.2.5.Avantages de l'étude des surfaces.....	11
I.3. Première zone de Brillouin et direction de symétrie.....	11
I.3.1. Zone de Brillouin.....	11
I.3.2. Cas de la surface (100) d'un réseau cubique simple.....	11
I.3.2.1. Réseau direct.....	11
I.3.2.2. Réseau réciproque.....	12
I.4. Les méthodes utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes des ordonnées.....	13
I.4.1. La méthode de diagonalisation direct (ou Slab method)	13
I.4.2.La méthode des fonctions de Green.....	14
I.4.3.La méthode de raccordement.....	14
I.4.5.Formulation générale de la méthode de raccordement	15
I.4.5.1.Régions parfaites (volume) (RVG et RVD)	16

I.4.5.2.Régions de surface (défaut) (RD)	16
I.4.5.3.Régions de raccordement (RRG et RRD)	17
I.4.5.4.Formulation du problème.....	17
I.5. Conclusion.....	18
Bibliographie.....	19

Chapitre II Propriétés dynamiques et de diffusion d'onde élastique par un défaut implanté

II.1. Introduction.....	21
II.2. Description du modèle.....	22
II.2.1 Etapes préliminaires.....	22
II.2.2. Principes et détails des calculs.....	24
II.2.3. Les équations de mouvement.....	24
II.2.4. La matrice dynamique et équations propres.....	25
II.3. Dynamique en volume	26
II.3.1 Dispersion	26
II.3.2 Facteur de phase	27
II.3.3.Vitesse de groupe V_g	29
II.4. Diffusion (une couche mince un plan insérée)	30
II.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	33
II.4.2. Conductance phononique.....	34
II.4.3. Etats localisés	35
II.4.4. Densité d'état.....	37
II.5. Diffusion (une couche mince deux plans insérées)	39

II.5.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	39
II.5.2. Conductance phononique.....	41
II.5.3. Etats localisés	42
II.5.4. Densité d'état.....	43
II.6. Diffusion (une couche mince trois plans insérées)	44
II.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	44
II.6.2. Conductance phononique.....	46
II.6.3. Etats localisés.....	47
II.6.4. Densité d'état.....	48
II.7. Résultats et discussion.....	49
 Bibliographie.....	 52

Chapitre III- Propriétés magnétiques

III.1. Introduction.....	56
III.2. Description du modèle.....	57
III.2.1. Propriété magnétique en volume.....	57
III.2.2. Branches de dispersion et facteur de phase.....	60
III.2.3. Vitesses de groupe.....	61
III.2.4. diffusion (Une couche mince un plan insérée)	63
III.2.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	63
III.2.4.2. Conductance magnonique.....	65
III.2.4.3. Etats localisés.....	65
III.2.4.4. Densité d'état.....	67
III.2.5. diffusion (Une couche mince deux plans insérées)	68
III.2.5.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	68
III.2.5.2. Conductance magnonique.....	70
III.2.5.3. Etats localisés	70

III.2.5.4. Densité d'état.....	72
III.2.6. diffusion (Une couche mince trois plans insérées)	73
III.2.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion.....	73
III.2.6.2. Conductance magnonique.....	75
III.2.6.3. Etats localisés	75
III.2.6.4. Densité d'état.....	77
III.3. Résultats et discussion.....	78
III.4. Description du modèle.....	79
III.4.1. Formulation du problème.....	81
III.4.1.1. Matrice dynamique du système perturbé.....	82
III.4.1.2. Matrice de raccordement	82
III.4.1.3. Calcul des grandeurs physiques.....	85
III.4.2. Calcul des coefficients de réflexion et de transmission.....	85
III.4.3. Calcul de la conductance magnonique.....	88
III. 5. Résultats et discussion.....	90
 Bibliographie.....	 92

Chapitre IV- Propriétés électroniques

IV.1. Introduction.....	95
IV.2. Description du modèle.....	95
IV.2.1. Propriété électronique en volume.....	95
IV.2.2. Branches de dispersion et facteur de phase.....	100
IV.2.3. Vitesses de groupe.....	101

IV.2.4. diffusion (Une couche mince un plan insérée)	102
IV.2.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion	102
IV.2.4.2. Conductance électronique	103
IV.2.4.3. Etats localisés	104
IV.2.4.4. Densité d'état	105
IV.2.5. diffusion (Une couche mince deux plans insérées)	107
IV.2.5.1. Coefficients de transmission et de réflexion	107
IV.2.5.2. Conductance électronique	108
IV.2.5.3. Etats localisés	109
IV.2.5.4. Densité d'état	110
IV.2.6. diffusion (Une couche mince trois plans insérées)	112
IV.2.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion	112
IV.2.6.2. Conductance électronique	113
IV.2.6.3. Etats localisés	114
IV.2.6.4. Densité d'état	115
IV.3. Résultats et discussion	117
Bibliographie	119

Liste des figures

Chapitre I- Introduction à l'étude de surface et interface

Figure I.1. Les réseaux de Bravais à 2D.....	10
Figure I.2. Représentation des réseaux directs en (a) et réciproque en (b) ainsi que la première zone de Brillouin en (c) de la surface (100).....	13
Figure I.3. Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui cite les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume.....	15
Figure I.4. Représentation schématique les différents zones semi-infinis parfaits par la méthode de raccordement.....	16

Chapitre II- Propriétés dynamiques et de diffusion d'onde élastique par un défaut implanté

Figure II. 1a. Représentation du couche mince pour un plan de défaut inséré	22
Figure II. 1b. Représentation du couche mince pour 2 plan de défaut insérés.....	23
Figure II. 1c. Représentation du couche mince pour 3 plan de défaut insérés.....	23
Figure II.2. Branches de dispersion de mode1 et mode2 en fonction du rapport ϕx et r_2 de la constante élastique des premier et deuxième voisins.....	27
Figure II.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction de r_2 et de la fréquence sans dimension Ω	28
Figure II.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction r_2 (image Z et réel Z).....	28
Figure II.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω	29
Figure II.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement	33
Figure II.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	33
Figure II.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement	34
Figure II. 9. Conductance phononique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et constante élastique du système perturbé.	34
Figure II. 10. Etats localisé dans le cas du mode d'adoucissement.....	35
Figure II. 11. Etats localisé dans le cas du mode homogène.....	36

Figure II. 12. Etats localisé dans le cas du mode de durcissement.....	36
Figure II. 13. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	38
Figure II. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	38
Figure II. 15. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	39
Figure II.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	39
Figure II.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement.....	40
Figure II.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.....	40
Figure II. 19. Conductance phononique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et constante élastique du système perturbé.	41
Figure II. 20. Etats localisé dans le cas du mode durcissement	41
Figure II. 21. Etats localisé dans le cas du mode homogène	42
Figure II. 22. Etats localisé dans le cas du mode d'adoucissement	42
Figure II. 23. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	43
Figure II. 24. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	43
Figure II. 25. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	44
Figure II.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.....	44
Figure II.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	45
Figure II.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement.....	45
Figure II. 29. Conductance phononique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et constante élastique du système perturbé.	46
Figure II. 30. Etats localisé dans le cas du mode d'adoucissement	46
Figure II. 31. Etats localisé dans le cas du mode homogène.....	47
Figure II. 32. Etats localisé dans le cas du mode durcissement	47
Figure II. 33. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	48

Figure II. 34. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	48
Figure II. 35. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	49

Chapitre III- Propriétés magnétiques

Figure III. 1a. Représentation du couche mince pour un plan de défaut inséré	57
Figure III. 1b. Représentation du couche mince pour 2 plans de défaut insérés.....	58
Figure III. 1c. Représentation du couche mince pour 3 plans de défaut insérés.....	58
Figure III.2. Branches de dispersion de mode1 et mode2 en fonction du rapport ϕx et J_2 intégrale d'échange entre les premiers voisins.....	60
Figure III.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction de r_2 et de la fréquence sans dimension Ω	61
Figure III.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction J_2 (image Z et réel Z).....	61
Figure III.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω	63
Figure III.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement	63
Figure III.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène	64
Figure III.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement	64
Figure III. 9. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω intégrale d'échange entre les premiers voisins	65
Figure III. 10. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.....	65
Figure III. 11. Etats localisés dans le cas du mode homogène.....	66
Figure III. 12. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.....	66
Figure III. 13. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	67
Figure III. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	67
Figure III. 15. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	68

Figure III.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.....	68
Figure III.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	69
Figure III.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement...	69
Figure III. 19. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et intégrale d'échange entre les premiers voisins ..	70
Figure III. 20. Etats localisée dans le cas du mode d'adoucissement.....	70
Figure III. 21. Etats localisée dans le cas du mode homogène ..	71
Figure III. 22. Etats localisée dans le cas du mode durcissement.....	71
Figure III. 23. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω ..	72
Figure III. 24. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω ..	72
Figure III. 25. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω ..	73
Figure III.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.....	73
Figure III.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	74
Figure III.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement..	74
Figure III. 29. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et intégrale d'échange entre les premiers voisins.....	75
Figure III. 30. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.....	75
Figure III. 31. Etats localisés dans le cas du mode homogène ..	76
Figure III. 32. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.....	76
Figure III. 33. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω ..	77
Figure III. 34. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω ..	77
Figure III. 35. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω ..	78
Figure III.36. Représentation schématique de l'interface magnétique couplant.....	79

Figure III.37. Courbes de dispersion des magnons d'ordre ferromagnétique de CS pour φ_z courant $[-\pi, +\pi]$ et $\varphi_x=0, \varphi_y=0$.	80
Figure III.38. Représentation d'une onde de spin diffusée par une interface magnétique. Visualisation des ondes résultantes: onde réfléchie (OR) et onde transmise (OT).	83
Figure III.39. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange a) $J_A=1, J_{AB}=1,5, J_B=2$ et $S_A=S_B$.	89
Figure III.40. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange b) $J_A=1, J_{AB}=0,5, J_B=2$ et $S_A=S_B$.	89
Figure III.41. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange c) $J_A=1, J_{AB}=2,0, J_B=2$ et $S_A=S_B$.	90

Chapitre IV – Propriétés électroniques

Figure IV. 1a. Représentation du couche mince pour un plan de défaut inséré	96
Figure IV. 1b. Représentation du couche mince pour 2 plans de défaut insérés.	96
Figure IV. 1c. Représentation du couche mince pour 3 plans de défaut insérés.	97
Figure IV.2. Branches de dispersion en fonction du rapport ϕ_x et intégrale de saut Harrison des premiers voisins.	100
Figure IV.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction de r_2 et de la fréquence sans dimension Ω .	100
Figure IV.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction r_2 (image Z et réel Z).	101
Figure IV.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω .	101
Figure IV.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement	102
Figure IV.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène	102
Figure IV.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement	103
Figure IV. 9. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et des intégrales de saut de Harrison.	103
Figure IV. 10. Etats localisé dans le cas du mode de durcissement	104

Figure IV. 11. Etats localisé dans le cas du mode homogène.....	104
Figure IV. 12. Etats localisé dans le cas du mode d'adoucissement.....	105
Figure IV. 13. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	105
Figure IV. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	106
Figure IV. 15. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	106
Figure IV.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	107
Figure IV.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement.....	107
Figure IV.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.....	108
Figure IV. 19. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et des intégrales de saut de Harrison.....	108
Figure IV. 20. Etats localisé dans le cas du mode de durcissement.....	109
Figure IV. 21. Etats localisé dans le cas du mode homogène.....	109
Figure IV. 22. Etats localisé dans le cas du mode d'adoucissement.....	110
Figure IV. 23. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	110
Figure IV. 24. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	111
Figure IV. 25. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	111
Figure IV.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement.....	112
Figure IV.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.....	112
Figure IV.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de d'adoucissement.....	113
Figure IV. 29. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et constante élastique du système perturbé.....	113
Figure IV. 30. Etats localisés dans le cas du mode durcissement	114

Figure IV. 31. Etats localisés dans le cas du mode homogène	114
Figure IV. 32. Etats localisés dans le cas du mode de d'adoucissement.....	115
Figure IV. 33. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω	115
Figure IV. 34. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω	116
Figure IV. 35. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω	116

Introduction générale

Introduction générale

Au fil des cent dernières années, les études sur la fabrication et les utilisations technologiques des matériaux à couches minces ont connu un progrès considérable. L'intérêt réside dans la constatation que leurs caractéristiques physiques diffèrent de celles des solides de tailles massifs en 3D, en utilisant différentes méthodes expérimentales [1], En régulant la dimension des entités nanométriques et la composition de ces composants, il devient plus facile d'analyser leurs caractéristiques dynamiques, électroniques et magnétiques [2, 3].

En raison de leurs multiples applications expérimentales et théoriques potentielles, ces couches minces sont souvent obtenues dans le domaine de la recherche, comme les cellules solaires [4], les transducteurs piézoélectriques [5] et les détecteurs de gaz [6], entre autres. L'organisation locale de la matière est altérée par les forces interatomiques. Les lois qui régissent la matière à cette échelle sont mises en lumière en analysant la configuration de la nanostructure et ses comportements interchangeables. Grâce à cette compréhension, il devient possible de concevoir et de structurer de nouveaux dispositifs atomiques afin d'obtenir les caractéristiques désirées ou de découvrir de nouvelles applications potentielles.

L'analyse des surfaces met en évidence une structure périodique spontanée et organisée de la surface avec des périodes allant de 1 à 100 nm [7]. Il est possible de cultiver des nanostructures périodiques et auto-assemblées de grande densité en utilisant ces surfaces auto-organisées [8-9]. Les surfaces à marches, aussi connues sous le nom de surfaces voisines, sont de plus en plus employées afin de favoriser la croissance de nanostructures organisées. On a analysé plusieurs formes de nano structuration de surface, comme les reconstructions de surfaces et les réseaux de dislocations [10, 11].

Plusieurs approches sont néfastes, ce qui encourage l'utilisation de techniques optiques sans contact et non néfastes. Étant donné qu'il n'y a pas une seule méthode qui puisse nous donner toutes les données sur la structure d'une surface, il est important de noter qu'il n'existe pas une seule méthode.

Les défauts ponctuels, les lacunes, les atomes substitutionnels et interstitiels, les dislocations, les fautes d'empilement, les joints de grains et les surfaces font partie des nombreuses propriétés macroscopiques des matériaux. Les liaisons coupées et distordues caractérisent ces défauts à l'échelle atomique [12-19].

Les phonons près des défauts sont difficiles à analyser et diffèrent de ceux d'un guide d'ondes parfait. L'inhomogénéité a un impact significatif sur les caractéristiques vibrationnelles du système ; elle peut engendrer de nouveaux états situés à proximité du défaut et les diffuser en volume dans les directions des symétries de haute fréquence [20, 26].

Les fonctions d'ondes sont évanescences lorsque la symétrie translationnelle est perturbée par la présence d'une surface, ce qui entraîne la création de nouvelles solutions mathématiques avec un vecteur d'onde complexe dans la direction perpendiculaire à la surface. En fait, on désigne ces conditions sous le nom d'états de surface. Dans certaines conditions, l'organisation de la surface permet de différencier les sites d'adsorption ou de déterminer l'orientation des groupements vibrationnellement actifs.

L'objectif de cette étude est d'approfondir notre compréhension de certaines caractéristiques physiques des matériaux et de la diffusion d'ondes élastiques, magnétiques et électroniques dans des systèmes de basses dimensions présentant des formes planes quasi-bidimensionnelles en présence de défauts atomiques. L'objectif de cette étude est de développer et d'appliquer des techniques analytiques et de simulation numériques à partir d'un modèle. Les courbes des phénomènes étudiés sont obtenues en utilisant des programmes de simulation adaptés "MATLAB" qui reposent sur des algorithmes d'analyse numérique appropriés. À l'existence de trois catégories différentes de défauts atomiques : la première comprend un seul plan inséré dans un plan adjacent d'une structure cubique simple de masses m . Dans le deuxième exemple, deux plans sont insérés. Dans le troisième cas, trois plans insérés tous parallèles à l'axe (oy) .

Les concepts de base de la cristallographie et quelques généralités sur l'étude des surfaces ont été rappelés dans le premier chapitre de ce manuscrit.

Ensuite, nous avons discuté des différentes définitions et concepts de l'étude de surface, des notations utilisées pour décrire les structures de surface et des méthodes théoriques utilisées pour l'étude et leur analyse.

Le formalisme mentionné dans le chapitre précédent est utilisé directement dans le deuxième chapitre. Il utilise un guide d'onde parfaitement ordonné pour traiter la dynamique des phonons. Les courbes de dispersion, leurs modes propageant et évanescents, ainsi que les vitesses de groupe requises pour l'analyse de la dispersion, seront définies. Ils seront utilisés

pour normaliser les grandeurs physiques, comme les coefficients de réflexion et la transmission du défaut, pour différents plans insérés. La thèse est synthétisée suivant ce plan :

Dans le premier chapitre on a abordé les différentes méthodes adaptées dans le cas des systèmes avec brisures de symétrie. Dans la chapitre 2 on a présenté les propriétés vibrationnelles en volume, les états localisés au voisinage du défaut, la diffusion des ondes élastiques par le défaut notamment les coefficients de transmission, de réflexion et la conductance phonique. Dans le chapitre 3 on a donné les propriétés magnétiques, ensuite dans le chapitre 4 les propriétés électroniques. Enfin on a présenté les conclusions générales de nos différents travaux.

Références bibliographiques

- [1] A. Boulle, O. Masson, R. Guine bretiere and A. Dager, *Strain profiles in yttria stabilized zirconia epitaxial thin films determined by high-resolution X-ray diffraction* ,Thin Solid Films 450, 66 (2004).
- [2] A. S. Edelstein and R. C. Cammarata, *Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications*, Institute of Physics Publishing, Bristol & Philadelphia (1996).
- [3] F. Leroy, Thèse de Doctorat, Grenoble, France (2004).
- [4] G .C. Hadjipanayis, R.W. Siegel eds. *Mechanical Properties of Nanophase Materials* ,Nanophase Materials: Synthesis, Properties and Applications, Kluwer, USA (1994).
- [5] H. Gleiter, *Nanocrystalline Materials*, Prog. Mater. Sci., 33, 223 (1989).
- [6] H. Lichtenberger, M. Mühlberger, F. Schäffler, *Ordering of Si_{0.55}Ge_{0.45} islands on vicinal Si(001) substrates: Interplay between kinetic step bunching and strain-driven island growth*, Appl. Phys. Lett. 86 (2005).
- [7] L. E. Koutsokeras, G. Abadias, P. Patsalas, *Texture and microstructure evolution in single-phase Ti_xTa_{1-x}N alloys of rocksalt structure* ,J. Appl. Phys. 110, 043535 (2011).
- [8] L. Niu, D. J. Gaspar and S. J. Sibener, *Phonons Localized at Step Edges: A Route to Understanding Forces at Extended Surface Defects* ,Science 268, 847 (1995).
- [9] M.C. Carotta, A. Cervi, V. di Natale, S. Gherardi, A. Giberti, V. Guidi, D. Puzzovio, B. Vendemiati, G. Martinelli, M. Sacerdoti, D. Calestani, A. Zappettini, M. Zha, L. Zanotti, *ZnO gas sensors: A comparison between nanoparticles and nanotetrapods-based thick film*, Sensors and Actuators B: Chemical, Volume 137, Issue 1, 28 March 2009, Pages 164-169
- [10] M. Krunks, A. Katerski, T. Dedova, I. Oja Acik, A. Mere, *Nanostructured solar cell based on spray pyrolysis deposited ZnO nanorod array*, Solar Energy Materials and Solar Cells, Volume 92, Issue 9, September 2008, Pages 1016-1019.

- [11] P .L. Chen, C. T. Kuo, T.G. Tsai, B. W. Wu, C .C. Hsu, and F. M. Pan, *Self-organized titanium oxide nanodot arrays by electrochemical anodization* ,Appl. Phys. Lett. 82, 2796 (2003).
- [12] S.C. Ko, Y.C. Kim, S.S. Lee, S.H. Choi, S.R. Kim, *Micromachined piezoelectric membrane acoustic device*, Sensors Actuators A 103, (2003) pp-130-134.
- [13] S. Rousset, B. Croset, V. Repain. Y. Girard, G. Prévot, V. Repain, S. Rohart, *Self-organized epitaxial growth on spontaneously nano-patterned templates* Nucléation et croissance de nanostructures ordonnées sur des surfaces auto-organisées ,C. R. Phys VI, 33 (2005).
- [14] S. S. Mahajan, M. D. Bambole, S. P. Gokhale and A. B. Gaikwad, *Monitoring structural defects and crystallinity of carbon nanotubes in thin films*,Prana J. Phys. 74, 447 (2010).
- [15] V. Repain, J.M. Berroir, S. Rousset, J. Lecoer, *Growth of self-organized cobalt nanostructures on Au(111) vicinal surfaces* ,Surf. Sci. 447, L152 (2000).

Chapitre I

Introduction à l'étude de *surface et interface*

I.1. Introduction

La composition chimique de surface des matériaux solides et leurs modes de préparation sont à l'origine de leurs interactions avec le milieu extérieur. Les surfaces externes altèrent les caractéristiques physiques et chimiques du matériau. Ces surfaces sont très sensibles en termes de structure atomique, ce qui provoque des défauts tels que des lacunes, des marches, des impuretés et divers autres défauts.

Les propriétés de surface sont affectées par la structure, la composition chimique, l'orientation des positions atomiques, la température et les pourcentages atomiques mélangés dans le cas des alliages.

L'analyse des surfaces revêt une grande importance, car elle permet de saisir la structure et l'équilibre des cristaux dans les sites et les interactions catalytiques associées.

La surface est une région qui s'étend sur une certaine épaisseur sur plusieurs niveaux atomiques, donc la matière se déplace entre son volume interne et le milieu environnant, ce qui conduit à une rupture dans l'arrangement périodique des derniers atomes.

Le nombre de voisins les plus proches de l'atome en surface est inférieur au volume, de sorte que les atomes ont tendance à échanger de nouvelles liaisons avec les atomes les plus proches d'eux soit en surface ou en volume de base ou avec des atomes et des molécules ou même avec des types de l'environnement extérieur [27] et en fonction de leur orientation il se produit une grande interaction avec l'environnement. Dans ce chapitre, nous avons compilé quelques concepts de base pour comprendre, étudier et analyser les nanostructures avec défaut structuraux ou implantés.

I.2. Importance de l'étude des surfaces

I.2.1. Surface microscopique

La surface représente un environnement asymétrique dans lequel les noyaux et la structure électronique sont modifiés par rapport aux atomes de volume, ce qui conduit à une structure de surface qui peut être complètement différente du reste de la structure cristalline.

Il existe des niveaux élevés de symétrie à l'intérieur du cristal (déterminés en cristallographie par des indicateurs de Miller faibles). Lorsque le cristal est coupé, ces niveaux

atomiques denses apparaissent, lesquels sont des niveaux de croissance cristalline normaux et peuvent être observés par la macroscopie en raison de leurs aspects distinctifs .

I.2.2.Rappel sur la cristallographie

I.2.2.1.Structure cristalline

L'état cristallin est un arrangement compact et périodique des atomes du solide. Un système parfait est constitué par la répétition d'un motif atomique, appelé *base*, un *réseau* défini suivant trois *vecteurs de translation* $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. donc :

$$\text{Structure cristalline} = \text{réseau} + \text{base}$$

Tous les points A du réseau tels que $\vec{OA} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ voient le même environnement atomique que O, A partir d'une origine O. Toutes les parties en question II a créé un réseau de points appelés *nœuds du réseau*. L'ensemble des données d'une base et d'un réseau constitue donc la structure cristalline entièrement. Pour tous les points A voient le même environnement atomique que O alors les vecteurs de translation sont dit *fondamentaux* ou *primitifs*, on peut trouver des entiers n_1, n_2, n_3 tels que:

$$\vec{OA} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$$

La *maille* c'est le volume défini par n_1, n_2, n_3 . Elle permet de remplir tout l'espace en appliquant les opérations de translation convenables. Une maille définie par les vecteurs de translation fondamentaux est dite primitive ou élémentaire. C'est en fait une maille de volume minimal [7].

Considérons un réseau tridimensionnel semi-infini, constitué d'atomes l dont les coordonnées s'écrivent :

$$\vec{R} = X_1\vec{i} + Y_1\vec{j} + Z_1\vec{k} \quad (\text{I.1})$$

Dans la base du réseau direct appropriée $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ telle que le vecteur \vec{k} est perpendiculaire à la surface d'équation $z = 0$.

Une maille élémentaire du réseau direct $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, contenant n_0 d'atomes, d'indices

$$\begin{aligned}\vec{a} &= a_x \vec{i} + b_y \vec{j} + c_z \vec{k} \\ \vec{b} &= b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k} \\ \vec{c} &= c_x \vec{i} + c_y \vec{j} + c_z \vec{k}\end{aligned}\tag{I.2}$$

La volume de cette maille élémentaire:

$$V = \vec{a} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{c})\tag{I.3}$$

La position de tout atome du réseau s'obtient donc à partir d'un atome de cette maille par une translation

$$\vec{R}_l = \vec{R}_0 + \vec{T}_l \text{ Ou: } \vec{T}_l = n_x \vec{a} + n_y \vec{b} + n_z \vec{c}\tag{I.4}$$

La maille du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ correspondante est définie par :

$$\begin{aligned}\vec{A} &= 2\pi(\vec{b} \wedge \vec{c}) / V \\ \vec{B} &= 2\pi(\vec{c} \wedge \vec{a}) / V \\ \vec{C} &= 2\pi(\vec{a} \wedge \vec{b}) / V\end{aligned}\tag{I.5}$$

Avec

$$\vec{a} \cdot \vec{A} = \vec{b} \cdot \vec{B} = \vec{c} \cdot \vec{C} = 2\pi\tag{I.6}$$

$$\vec{a} \cdot \vec{B} = \vec{a} \cdot \vec{C} = \vec{b} \cdot \vec{A} = \vec{b} \cdot \vec{C} = \vec{c} \cdot \vec{A} = \vec{c} \cdot \vec{B} = 0$$

I.2.2.2. Réseau de Bravais bidimensionnel

La surface est un objet périodique à deux dimensions, son réseau de Bravais est donc l'un des 2 réseaux 2D possibles : carré, rectangulaire, hexagonal, quadrillage central rectangulaire et oblique. Ces réseaux sont décrits en choisissant deux vecteurs non colinéaires A et B qui se distinguent particulièrement par leur longueur et l'angle entre eux

De nombreux travaux théoriques liés à la dynamique vibratoire sont étudiés dans les systèmes cubiques et les systèmes hexagonaux, c'est ce qui nous a amené à aborder ce type d'études.

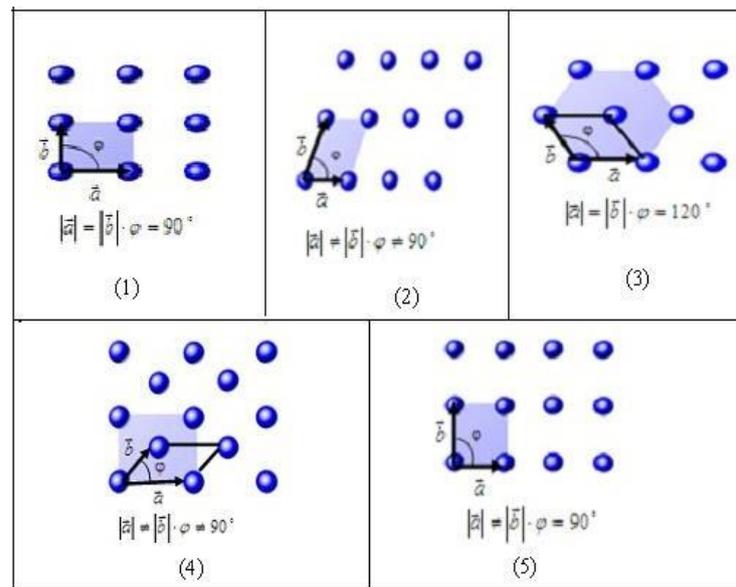


Figure 1.1. Les réseaux de Bravais à 2D [1]

I.2.2.3.L'effet de surface

De deux façons, la présence de la surface influence les phénomènes physiques et chimiques qui se déroulent dans le matériau:

I.2.2.3.a- Le comportement de la matière en surface :

Lorsque les atomes interagissent les uns avec les autres et que cela affecte la fonction d'onde des niveaux d'énergie électronique admissibles, et l'apparition de défauts d'ingénierie dans le matériau ou sur la surface, ce qui provoque la présence de propriétés électriques spécifiques

I.2.2.3.b- L'un des phénomènes résultant de l'impact de la matière solide sur le milieu extérieur est le phénomène de vibration, où la surface a tendance à combler les lacunes résultant de l'insaturation de toutes les liaisons, et elles sont comblées en captant des particules passant dans le voisinage.

I.2.2.4.structures de surface

L'étude géométrique de la figure de diffraction montre des images de diffraction où le réseau réciproque des superstructures formées est représenté : La méthode simple utilisée en science des surfaces permet de trouver une relation entre les vecteurs de base de la structure et les propriétés de la surface non reconstruite où deux symboles équivalents sont utilisés

I.2.2.5.Avantages de l'étude des surfaces

Au fil du temps, les études se sont orientées vers l'étude des surfaces, et cela est dû à leur importance, qui est représentée dans:

-Contrôle en surface de nombreuses activités intéressantes telles que : phonons de surface, plasmons de surface...

-La reconstruction de la surface modifie les propriétés physiques

-Phénomènes bidimensionnels (propriétés gazeuses des électrons bidimensionnels)

I.3.Première zone de Brillouin et directions de symétrie

I.3.1.Zone de Brillouin

D'après sa définition, la zone de Brillouin représente la maille de Wingner Seitz du réseau réciproque. Les vecteurs reliant un site au réseau réciproque à tous les sites voisins sont représentés, puis des plans bissecteurs sont tracés perpendiculairement à ces vecteurs. La zone de Brillouin est le domaine le plus restreint autour du site choisi, limité par ces plans.

Les zones supérieures de Brillouin sont construites de la même manière. La deuxième zone de Brillouin est l'espace limité par les plans bissecteurs perpendiculaires aux vecteurs reliant le premier site aux zones supérieures de Brillouin et les plans bissecteurs des zones inférieures de Brillouin [9].

I.3.2.Cas de la surface (100) d'un réseau cubique simple :

I.3.2.1. Réseau direct

La figure I.1-a présente une structure carrée du réseau direct de la surface (100), qui est constitué des deux vecteurs de base suivants:

$$\vec{a} \begin{pmatrix} a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}; \vec{b} \begin{pmatrix} -a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} \quad (\text{I. 7})$$

I.3.2.2. Réseau réciproque

Le réseau réciproque du réseau direct est obtenu à l'aide des deux vecteurs de base \vec{A}^* et \vec{B}^* définis par :

$$\begin{aligned} \vec{A}^* \cdot \vec{a} &= 2\pi \\ \vec{B}^* \cdot \vec{b} &= 2\pi \end{aligned} \quad (\text{I. 8})$$

$$\vec{B}^* \cdot \vec{a} = 0$$

$$\vec{A}^* \cdot \vec{b} = 0$$

Un simple calcul donne les résultats suivants :

$$\vec{A}^* \begin{pmatrix} 2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad (\text{I. 9})$$

$$\vec{B}^* \begin{pmatrix} -2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix}$$

Avec

$$\|\vec{A}^*\| = 2\sqrt{2}\pi/a \quad (\text{I. 10})$$

$$\|\vec{B}^*\| = 2\sqrt{2}\pi/a$$

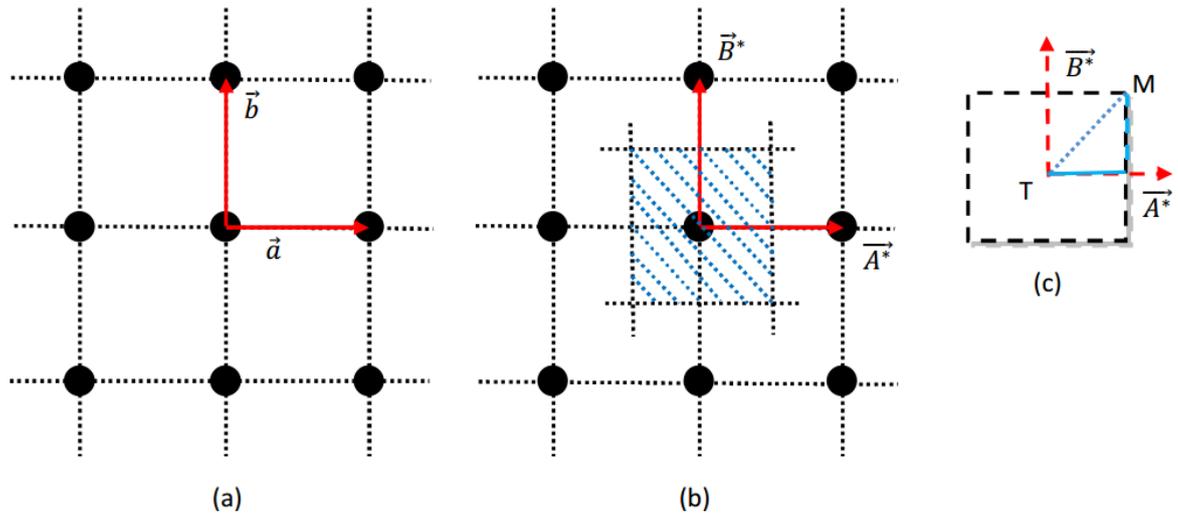


Figure I.2. Représentation des réseaux directs en (a) et réciproque en (b) ainsi que la première zone de Brillouin en (c) de la surface (100)

I.4. Les méthodes utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes des ordonnées

Il existe plusieurs méthodes pour l'étude des systèmes désordonnés. Nous citons parmi eux: la méthode de diagonalisation directe « *Slab Méthode* », la méthode des fonctions *de Green* et la méthode de *raccordement*.

I.4.1. La méthode de diagonalisation direct (ou Slab method)

en 1965 *Clark* introduite la formulation de Cette méthode [10].le première application a été réalisée par *Allen et All* sur un système physique [1, 2], En utilisant un nombre limité de plans atomiques de structure périodique pour modéliser les systèmes cristallins, il est possible d'étudier les états vibrationnels de surface en utilisant une région de volume au centre du système [6].

Cette méthode s'est imposée au cours des vingt dernières années comme une méthode utile et efficace pour étudier les propriétés vibrationnelles [10] et les phonons. La méthode diagonale directe se base sur la limitation des systèmes surfaciques étudiés à un nombre défini de niveaux atomiques dans une direction spécifique, comme la direction Z, avec une extension infinie dans les autres directions cartésiennes x et y [10]. Il est alors nécessaire d'écrire les équations concernant les mouvements des atomes faisant partie d'une maille élémentaire afin de déterminer la matrice dynamique qui est utilisée pour identifier les

vecteurs et les valeurs propres. Cela permet alors de calculer les courbes vectorielles de dispersion, de déplacement et de densités spectrales des atomes.

Enfin, l'utilisation de grandes matrices lors des simulations numériques présente l'inconvénient d'augmenter les temps de calcul, ce qui permet de développer des connaissances sur les propriétés vibrationnelles des surfaces et des interfaces.

I.4.2. La méthode des fonctions de Green

Lifshitz en 1948 a proposé une méthode de résolution utilisant les fonctions de *Green* [2], pour examiner les mouvements des surfaces cristallines [10]. Cette technique a été utilisée par *Rosenzweig* pour un modèle simple de cristal cubique avec des interactions centrales entre les atomes premiers et seconds voisins [5].

En annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre du plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs, cette technique permet de créer un réseau semi-infini à partir d'un réseau illimité [10].

La perturbation causée par la dynamique vibrationnelle des atomes transforme la matrice dynamique D d'un système illimité en une matrice D_p de la forme suivante. :

$$D_p = (D + P) \quad (\text{I. 11})$$

P : représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle

$G(w^2)$ la matrice des fonctions de *Green* défini par :

$$G(w^2) = [w^2 I - D]^{-1} \quad (\text{I. 12})$$

I : représente la matrice identité

L'ensemble des états vibrationnels du système perturbé est donné par les pôles de la fonction $G_p(w^2)$

$$G_p(w^2) = [I - G(w^2) \cdot P]^{-1} G(w^2) \quad (\text{I. 13})$$

Ils permettent d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration des atomes.

I.4.3. La méthode de raccordement

Feuchtwang avait introduit cette méthode en 1967 [3] pour étudier l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin à trois dimensions avec une limite qui est la surface, et

elle a été reprise en 1987 par *Szeftel* et *Khater* dans les deux articles [4]. Notre travail est basé sur cette méthode. En 1994 [6], *Khater -al* a utilisé la modélisation théorique pour relier numériquement de nombreux phénomènes physiques et systèmes réels, tels que les phonons de surface, la diffusion et le transport thermique des excitations magnétiques et vibrationnelles. au paragraphe qui suit nous détaillons le principe de la méthode.

I.4.5. Formulation générale de la méthode de raccordement

Les courbes de dispersion des modes localisés sont déterminées en utilisant la méthode de raccordement analytique [6]. En segmentant le solide en trois zones, cette approche permet de décrire les interactions entre les mouvements atomiques d'un système semi-infini à l'aide d'un nombre limité d'équations [6,10]. Le solide semi-infini est constitué de trois régions distinctes (voir figure I.3):

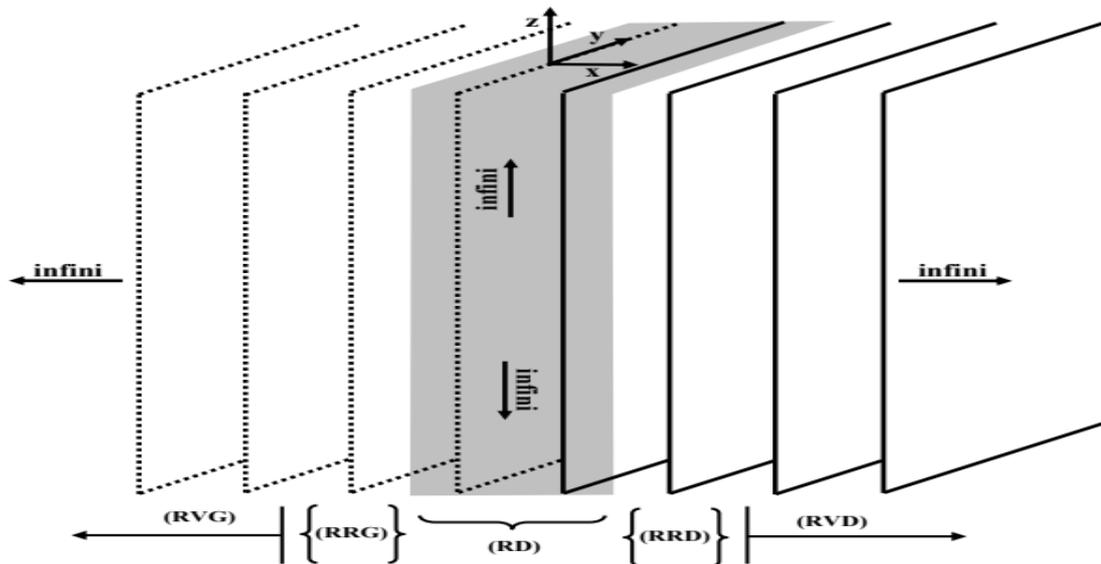


Figure I.3. Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui cite les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume [6]

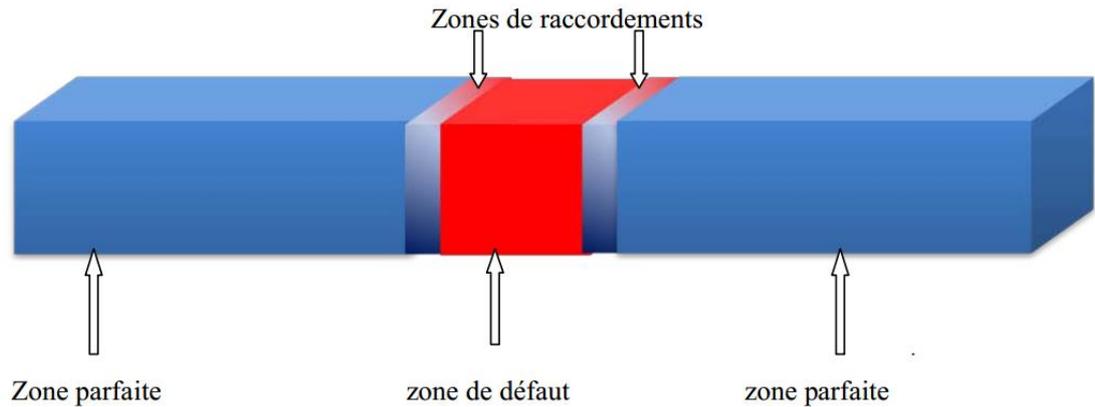


Figure I.4. Représentation schématique des différents zones semi-infinies parfaites par la méthode de raccordement [6]

I.4.5.1. Régions parfaites (volume) (RVG et RVD)

Il s'agit d'une partie du réseau d'atomes qui est éloignée du défaut de manière à le préserver de toutes ses conséquences. On peut trouver la zone à droite ou à gauche de la zone perturbée. Sa particularité réside dans sa structure tridimensionnelle et sa capacité à établir les courbes de dispersion en volume:

$$l > l_v \quad (\text{I. 14})$$

l_v représente la troisième coordonnée de l'atome associé au premier plan définissant la région de volume.

I.4.5.2. Régions de surface (défaut) (RD) :

Les premiers plans atomiques du système qui forment la surface de semi-infini constituent les régions de surface [10] (figure I.3). C'est la zone qui contient tous les types de défauts [6].

Une région ayant une périodicité bidimensionnelle (une symétrie de translation planaire), elle a généralement des propriétés vibrationnelles différentes de celles du volume et est affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques.

$$l < l_s \quad (\text{I. 15})$$

l_s représente coordonnée selon la direction normale à la surface par laquelle se manifeste la brisure de symétrie

I.4.5.3. Régions de raccordement (RRG et RRD) :

Une région intermédiaire entre la région parfaite et la région de défaut est appelée région de raccordement [6]. Elle permet de relier analytiquement les modes de surface aux états vibrationnels de la région de volume dans la modélisation théorique [10]:

$$l_s \leq l \leq l_v \quad (\text{I. 16})$$

D'après la description de la méthode de raccordement générale, que nous avons choisi pour notre étude.

I.4.5.4. Formulation du problème

Le solide semi-infini est un défaut provoqué par la présence d'une surface limitante qui perturbe la symétrie de translation dans la direction normale du défaut [11]. Les mouvements dans la direction cartésienne α entre un atome l à un plan P et un atome l' à un plan P' sont tous deux parallèles au défaut mais dans la région de volume.

L'équation du mouvement d'un atome occupant le site l est la suivante:

$$\omega^2 m(l) U_\alpha(l, \omega) = - \sum_{l' \neq l} \sum_\beta \left(\frac{r_{\alpha l'} r_{\beta l}}{r^2} \right) K(l, l') [U_\beta(l', \omega) - U_\beta(l, \omega)] \quad (\text{I. 17})$$

α et β représentent des directions cartésiennes

$m(l)$ indique la masse de l'atome du site l

$U_\alpha(l, \omega)$ le déplacement suivant la direction α

r_α représente la composante cartésienne du vecteur position joignant les sites l et l'

r le module du vecteur position

$K(l, l')$ La constante de force entre les atomes l et l'

ω la fréquence de vibration de l'atome considéré Pour (α, β)

On peut réduire le nombre de variables pour en avoir un système d'équations homogène facile à résoudre. Par conséquent, la direction normale de l'interface est suivie pour chaque donnée.

Par conséquent, les courbes de dispersion peuvent être calculées en appliquant l'équation de mouvement (I.17) à un site de volume.

I.5. Conclusion

En raison de l'importance de leurs études, nous avons tenté de donner une introduction à l'analyse théorique de la surface et de l'interface dans cette partie. Nous avons aussi inclus des concepts fondamentaux essentiels afin de simplifier la compréhension des lecteurs. Un rappel a été effectué concernant la cristallographie et la zone de Brillouin. Par la suite, nous avons d'abord exposé les trois méthodes mentionnées précédemment, puis nous avons expliqué en détail le principe de la troisième méthode, qui a été utilisé comme fondement de notre travail.

Références bibliographiques

- [1] B. Bourahla, *Modélisation théorique de la dynamique vibrationnelle des couches ultra minces des surfaces alliages métalliques ordonnées, avec applications aux systèmes de surfaces alliages Pd-Cu et Pd-Au*, Thèse de Doctorat . Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou.
- [2] I.M.Lifshitz, and L .N.Rosenzweig, *Izvest.Akad.Nank.S.S.S.R.Série Fiz.*12,667(1948)
- [3] J. Szefteland A .Khater, *Calculation of surface phonons and resonances: the matching procedure revisited: I*, *J.Phys.C:Solide.State.Phys.* 20, 4725(1987).
- [4] J. Szeftel, A .Khater, F.Mila, S.d'Addato and N.Auby, *Calculation of surface phonon dispersion on Ni(100) and Ni(100)+c(2×2) along the (010) direction by means of the matching procedure.II*, *J.Phys.C:Solide.State.Phys.*21, 2113(1988).
- [5] L.N. Rosenzweig, *Uchenye Zapiski Hark.Gosudarst.Univ.Trudy Fiz. Mat. Otdel.* 2, 19(1950)
- [6] M, Boucherrab, *Modélisation des propriétés d'une surface et interface d'un système hexagonal à 2D et 3D*, Thèse de Doctorat. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou (2015).
- [7] Rabhi Rachid, *Impact des défauts de structure sur la dynamique des spins dans un système tubulaire quasi-1D*, Mémoire de Magister. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou (2004)
- [8] S. Andrieu et P. Müller, *Les surfaces solides : concepts et méthodes*, EDP Sciences, CNRS Éditions, Paris (2005).
- [9] S. Kheffache, Mémoire de Magister, *Propagation d'ondes élastique dans les cristaux phononique bidimensionnels*. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou(2011)
- [10] Zheng Gai, G. A. Farnan, J. P. Pierce, and J. Shen, *Growth of low-dimensional magnetic nanostructures on an insulator*, *Appl. Phys. Lett.* Vol. 81, No. 4, 742-744. (2002) .

Chapitre II

Propriétés dynamiques et de diffusion d'onde élastique par un défaut implanté

II.1. Introduction

Le domaine de la dynamique vibrationnelle est très important pour les spécialistes physiques. Le domaine de la dynamique vibratoire englobe tous les phénomènes statiques et dynamiques associés aux vibrations des atomes et des molécules. La position spécifique des atomes dans un solide cristallin est due aux forces interatomiques. Dans le cadre d'un système "masse-ressort", ces forces jouent les mêmes fonctions que les ressorts [10].

Les atomes s'organisaient régulièrement et périodiquement dans une structure cristalline. L'excitation thermique est responsable des vibrations des atomes autour de leur position d'équilibre. Les forces interatomiques jouent un rôle entre les atomes, ce qui entraînera une vibration des autres atomes du cristal. Les propriétés des solides sont directement impactées par ces vibrations (chaleur spécifique, fusion, conductivité thermique) et indirectement (impact sur les électrons, interaction attrayante). Ces vibrations peuvent être provoquées par une agitation thermique ou une excitation électromagnétique [1].

Les vibrations atomiques sont liées à des "phonons" qui sont des quasi-particules. On favorise la propagation des phonons dans la phase solide, notamment dans la phase cristalline. Cependant, il est utile de distinguer les modes du réseau en fonction

Les circonstances peuvent être classées comme suit:

- Les modes de réseau sont les modes collectifs d'un cristal parfait qui existent indépendamment de la présence d'une impureté (soit par un mouvement de translation de l'ensemble du cristal "phonons acoustiques", soit par des mouvements internes du cristal). Les modes localisés correspondent à des modes de basse énergie de l'impureté du réseau.
- Les modes pseudo-localisés sont une combinaison des modes localisés et ceux du réseau[2].

II.2. Description de modèle

II.2.1 Etapes préliminaire

Nous avons opté pour une étude traditionnelle des vibrations sur un plan carré infini constitué d'atomes identiques capables de se déplacer dans deux directions de l'espace, connu sous le nom de système modèle. On représente les paramètres du système en assemblant des masses ponctuelles liées par des constantes de force k_1 et k_2 entre premiers et seconds voisins respectivement dans ce plan infini d'atomes « classiques » constitué de chaînes atomiques linéaires infinies.

Les équations du mouvement de l'atome illustrée sont écrites. Tous les sites sont équivalents car ils sont identiques dans un réseau parfait. Par conséquent, les équations du mouvement ne seront écrites que pour un seul atome et pourront être déduites en effectuant une simple translation en utilisant les deux directions cartésiennes x et y . La distance interatomique sera toujours égale à l'unité pour des raisons de simplification ($a=1$).

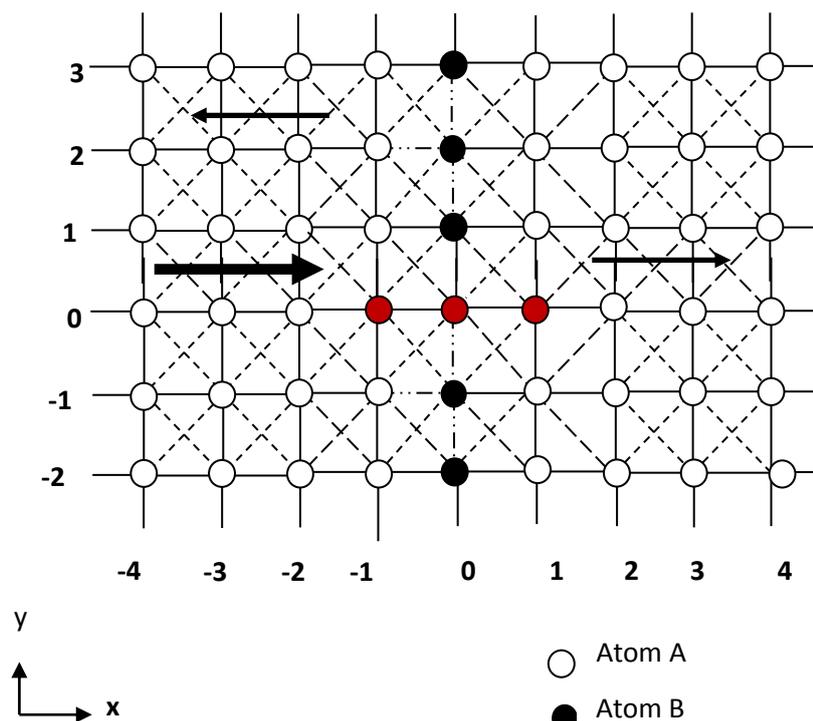


Figure II.1a. Représentation du couche mince pour un plan de défaut inséré.

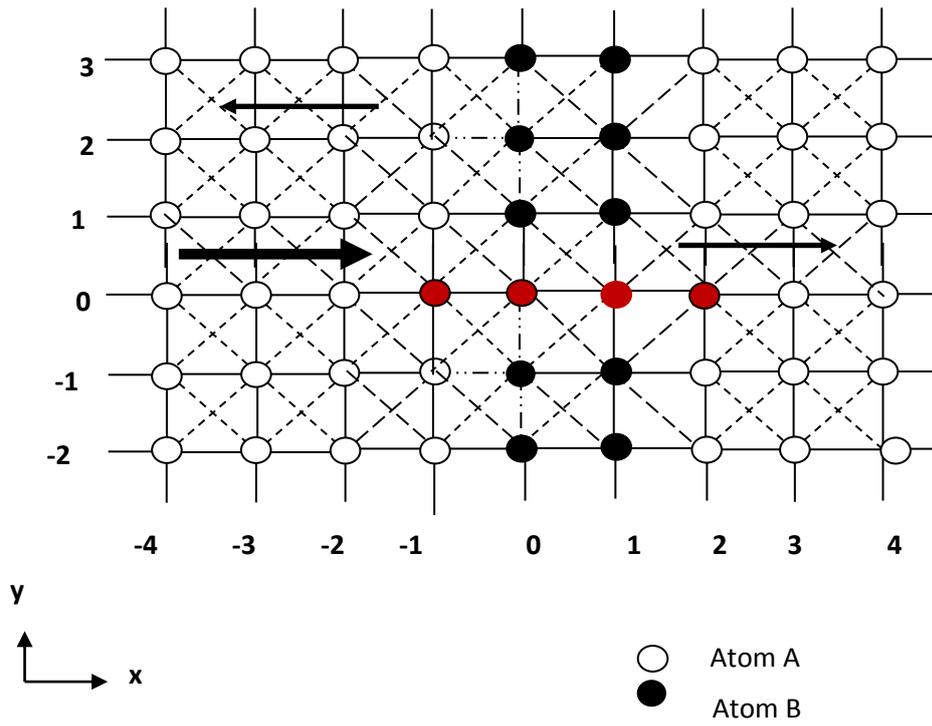


Figure II.1b. Représentation du couche mince pour 2 plans de défaut insérés

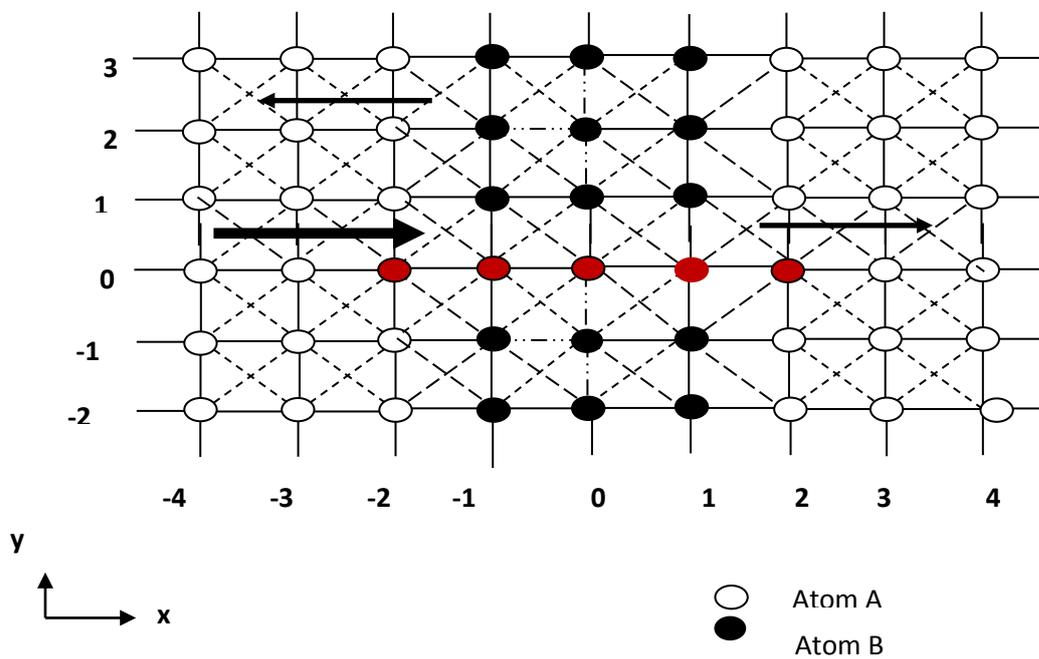


Figure II.1c. Représentation du couche mince pour 3 plans de défaut insérés

II.2.2. Principes et détails des calculs

La première partie de ce chapitre vise principalement à évaluer les caractéristiques vibrationnelles en utilisant la méthode de raccordement présentée dans le chapitre I.

II.2.3. Les équations de mouvement

La dynamique d'onde est décrite par les équations de Newton qui définissent les amplitudes des déplacements $u_\alpha(l)$ en un site (l) suivant α , où α désigne les deux directions de l'espace. Afin de déterminer la dynamique vibrationnelle de guide d'onde, nous allons écrire les équations de mouvements d'un atome de la surface en considérant les premiers et les seconds voisins dans le cadre de l'approximation harmonique [1] associée à la théorie des forces centrales. L'équation du mouvement d'un atome l est la suivante:

$$\omega^2 m(l) U_\alpha(l, \omega) = - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') [U_\beta(l', \omega) - U_\beta(l, \omega)] \quad (\text{II.1})$$

α et β représentent des directions cartésiennes

$m(l)$ indique la masse de l'atome du site (l)

$U_\alpha(l, \omega)$ le déplacement suivant la direction α

r_α représente la composante cartésienne du vecteur position joignant les sites (l) et (l')

r le module du vecteur position

$K(l, l')$ La constante de force entre les atomes (l) et (l')

ω la fréquence de vibration de l'atome considéré Pour (α, β)

(x, y) les différentes directions possibles de l'espace

Les projections de l'équation :

Que l'on peut formuler de manière développée comme suit :

a) La projection suivant $(\alpha = x)$ donne l'expression

$$\begin{aligned}
& -m \omega^2 U_x(m, n) \\
& = -\dot{K}_1 [U_x(m, n) - U_x(m, n + 1)] - \dot{K}_1 [U_x(m, n) - U_x(m, n - 1)] \\
& \quad - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m + 1, n - 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m - 1, n - 1)] \\
& \quad - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m - 1, n + 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m + 1, n + 1)] \\
& \quad + \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m + 1, n - 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m - 1, n - 1)] \\
& \quad + \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m - 1, n + 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m + 1, n + 1)]
\end{aligned}$$

b) La projection suivant ($\alpha = y$) donne l'expression:

$$\begin{aligned}
& -m \omega^2 U_y(m, n) \\
& = -\dot{K}_1 [U_y(m, n) - U_y(m, n + 1)] - \dot{K}_1 [U_y(m, n) - U_y(m, n - 1)] \\
& \quad - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m + 1, n - 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m - 1, n - 1)] \\
& \quad - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m - 1, n + 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_y(m, n) - U_y(m + 1, n + 1)] \\
& \quad + \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m + 1, n - 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m - 1, n - 1)] \\
& \quad + \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m - 1, n + 1)] - \frac{\dot{K}_2}{2} [U_x(m, n) - U_x(m + 1, n + 1)]
\end{aligned}$$

II.2.4. La matrice dynamique et équations propres

Des solutions d'ondes planes de la forme sont obtenues pour les atomes en question, dans des conditions aux limites appropriées:

$$U(l) = e^{i\vec{q}\vec{r}} U(l=0) \quad (\text{II.2})$$

\vec{r} la position d'équilibre atomique, \vec{q} le vecteur d'ondes

En rencontrant le défaut dans la direction $\mathbf{o}x$ du mouvement, l'onde peut être atténuée. Par conséquent, il serait pratique de relier les vecteurs de déplacement de deux atomes proches à l'aide d'un facteur d'atténuation z .

Le système linéaire suivant peut être utilisé pour résumer les équations précédentes :

$$[\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)]\vec{u} = \vec{0} \quad (\text{II.3})$$

I :représente la matrice identité

$\Omega^2 = \frac{m \omega^2}{K_1}$ est la fréquence propre de vibration

$r_{d2} = \frac{K_{12}}{K_1}$ le rapport entre les constantes de force des deuxièmes et premiers voisins

$$D(\varphi_y, z, r) = \begin{bmatrix} D_1 & D_3 \\ D_3 & D_2 \end{bmatrix} \quad (\text{II.4})$$

$D(\varphi_y, z, r)$:est appelée matrice dynamique

Si et seulement si le déterminant du système des trois équations (II 1), (II 3), (II 4) est nul qu' il n'admet pas de solution non triviale:

$$\text{Det}[\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)] = 0 \quad (\text{II.5})$$

II.3. Dynamique en volume

II.3.1 Dispersion

Nous présentons les résultats des propriétés vibrationnelles du système en volume.

La courbe de dispersion est influencée par les valeurs propres de la matrice de volume. Elle est calculée en fonction de l'angle d'incidence φ_x et des paramètres de volume du système. En raison de la dispersion de l'énergie dans le système, la relation de dispersion est non linéaire.

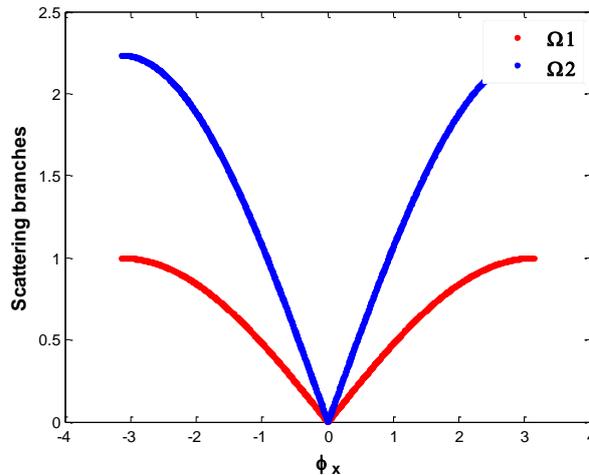


Figure II.2: Branches de dispersion de mode1 et mode2 en fonction de l'angle d'incidence ϕ_x et du rapport r_2 de la constante élastique des premier et deuxième voisins

II.3.2 Facteur de phase :

On peut noter, comme première remarque, une dépendance exponentielle de l'amplitude des facteurs de phase évanescents en fonction des fréquences. Physiquement, cela signifie que plus la fréquence d'excitation est élevée, plus l'atténuation des modes évanescents, caractérisés par le défaut, est forte. On peut aussi remarquer, d'autre part, que les facteurs de phase $Z_i < 1$ avec ($i = 1, 2$) ne décrivent des modes évanescents que lorsque la fréquence de l'état vibrationnel est en dehors d'une largeur de bande dont la largeur varie en fonction du rapport des constantes de force r_2 et de l'angle d'incidence Φ_y . Pour une fréquence appartenant à la bande passante des phonons de masse du système, les facteurs de phase ont un module égal à un pour les deux modes et se propagent. Pour avoir une vision complète des facteurs de phases incluant les deux modes, les modes propageant et atténués, il est intéressant de les représenter sur un graphe 3D les trajectoires parcourues dans le plan complexe par les facteurs de phase Z en fonction de la fréquence normalisée Ω . Pour une valeur fixe de $r_2 = 0,25$, on peut donc calculer le Z correspondant ; et ces solutions peuvent être représentées sur la courbe (les modes propageant) et à l'intérieur (les modes évanescents) d'un cercle unité du plan complexe. La figure 4 présente de telles courbes pour les différents modes 1 et 2 dans le cas d'une incidence $\phi_y = 0$ et $r_2 = 0,25$.

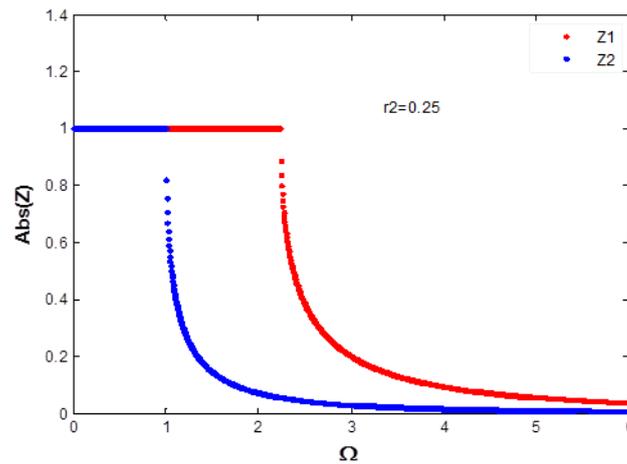


Figure II.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction de r_2 et de la fréquence sans dimension Ω .

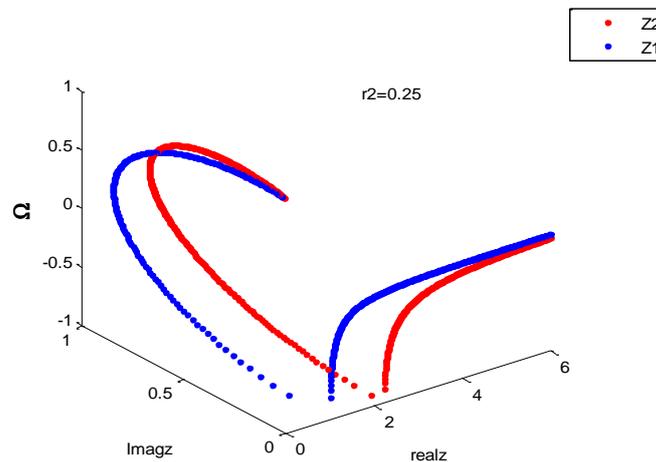


Figure II.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction r_2 (image Z et réel Z).

L'équation (2) admet des racines complexes ou réelles par paires Z et Z^{-1} , qui doivent être triés selon les considérations physiques suivantes : Commençons Z avec le complexe de norme 1. Les vecteurs d'onde sont, dans ce cas, réels et les couples, et le nombre de vibrations se propageant a été trouvé. La direction de propagation est donnée par le signe de la vitesse de groupe. Grâce à la parité des relations de dispersion, on peut choisir à chaque fréquence de chaque branche une onde se propageant de gauche à droite. Pour Z réels ou complexes, dont la norme est différente de 1, le critère de choix entre les deux termes du couple Z et Z^{-1} est moins arbitraire. En effet, l'une des solutions correspond à une onde atténuée, tandis que l'autre mode diverge selon la position de l'atome. La physique nécessite évidemment de ne

considérer que les modes atténués identifiés par la condition $|Z| < 1$. A l'inverse, les modes de propagation transportant de l'énergie sont caractérisés par $|Z| = 1$. Dans les figures 1 à 4, les relations entre la dispersion en volume en fonction de l'angle d'incidence ϕ , la valeur absolue des facteurs de phase 2D et 3D en fonction du rapport des constantes élastiques en volume entre premier et second voisins, et enfin, les vitesses de groupe des modes de propagation 1 et 2 sont présentées [9-15]

II.3.3. Vitesse de groupe V_g

La vitesse de groupe d'une onde de vibration est la vitesse de propagation du paquet d'ondes, qui est la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information sont transportées dans des milieux dispersifs. L'expression est utilisée pour définir des valeurs d'ondes réelles q :

Pour satisfaire la condition $|\mathbf{u}| \neq 0$, le système (1) doit vérifier les conditions de compatibilité suivantes :

$$\text{Det}[\Omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{D}(\rightarrow \mathbf{q}, r^2)] = 0. \quad (\text{II.6})$$

On obtient ainsi, pour chaque mode $(\rightarrow \mathbf{q}, \Omega)$, des solutions telles $|Z| \leq 1$

comme caractérisant les différentes ondes vibratoires se propageant dans la direction Oy parallèle au défaut.

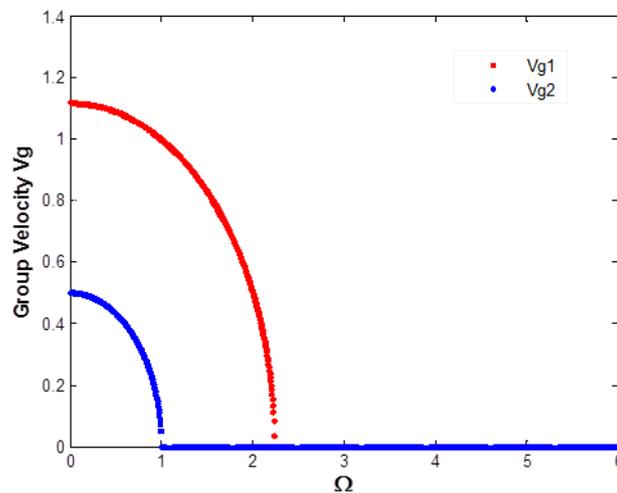


Figure II.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω

II.4. Diffusion (une couche mince un plan insérée)

Pour étudier le phénomène de diffusion, nous avons besoin de la matrice de défauts et de la matrice de raccordement, ainsi que du vecteur incident. Nous déterminons d'abord que la matrice de défauts qui provient de l'écriture des équations de mouvement des atomes qui décrivent l'inhomogénéité (Figure 1a–c). Cette région d'étude est choisie de telle sorte qu'elle comprenne la région perturbée ainsi que les atomes de la région correspondante et possède un environnement de guide d'onde parfait. La matrice correspondant à l'écriture des équations de mouvement de ces atomes est une matrice rectangulaire, qui peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$M_d|u\rangle=0. \quad (\text{II.7})$$

Cette section est destinée à établir une relation entre les déplacements vibrationnels des atomes dans le domaine perturbé et les champs de facteur de phase induits par l'étude des deux guides d'ondes parfaits dans le cadre de notre modélisation. Une combinaison linéaire représente les déplacements atomiques des sites appartenant à la région correspondante, définissant un espace fini. Il y a deux zones correspondantes à gauche et à droite du défaut dans ce cas, nous devons donc définir deux bases et deux fonctions. La première est pour la zone correspondante à gauche du système de défauts quasi bidimensionnel atomique, tandis que la seconde est pour la zone correspondante à droite du système. Les dimensions des vecteurs unitaires sont liées au nombre de valeurs propres et aux vecteurs propres obtenus par l'étude de la dynamique vibrationnelle des deux guides d'onde parfaits.

Soit un mode incident se propageant du guide d'onde parfait gauche vers le guide d'onde parfait droit, comme le montre la figure 1a–c. La zone de défaut divise l'onde diffusée en deux parties : l'une est transmise et l'autre est réfléchiée. Cela crée un champ vibrationnel de déplacement dans les deux demi-espaces. Les modes propres et les vecteurs propres induits par l'étude dynamique du volume doivent être développés. La méthode de raccordement peut être utilisée pour exprimer la composante cartésienne du champ de déplacement d'un atome en dehors de la région de défaut. La superposition de l'onde incidente avec les modes propres de vibration du guide d'onde parfait gauche à la même fréquence peut être utilisée pour

décrire les déplacements atomiques dans les deux directions cartésiennes d'un site atomique appartenant au guide d'onde parfait gauche [7,8,16–28].

$$u_{\alpha}(n,s)=u(v')\cdot Z^{-n}+\sum Z^{-n}\cdot R\cdot u(v') \quad \text{with} \quad n\leq -2. \quad (\text{II.8a})$$

De même, pour un site atomique du guide d'onde droit parfait, les déplacements atomiques peuvent s'exprimer comme suit :

$$u_{\alpha}(n,s)=\sum v'(Zv')^{nx}\cdot T\cdot u(\alpha,v') \quad \text{with} \quad s>2. \quad (\text{II.8b})$$

Comme nous le verrons plus loin, la quantité R est liée aux coefficients de réflexion d'un mode incident selon les modes propres du guide d'onde gauche parfait pour une fréquence spécifique. La grandeur associée aux coefficients de transmission du mode incident v selon les modes propres v du guide d'onde droit est également connue sous le nom de J . Le déplacement atomique des sites vers les deux demi-espaces parfaits, à gauche et à droite du défaut, est représenté par les grandeurs physiques, qui sont déterminées à l'aide des vecteurs propres des matrices dynamiques des deux guides d'ondes parfaits.

Les coefficients de transmission et de réflexion sont calculés pour un mode propageant, dans le domaine des fréquences pour le mode 1 $\Omega_1 = [0, 1]$ et pour le mode 2 $\Omega_2 = [0, 2,4]$.

Il est possible de diviser le vecteur des déplacements atomiques des sites de la cellule élémentaire des zones de défaut et de région de raccordement en deux parties :

La première étape sont des sites irréductibles qui composent la zone de défaut. La seconde est composée de sites de raccordement et certains sites de défaut. En laissant les deux bases ensemble, nous aurons:

$$|u\rangle=(|irr\rangle,|rac\rangle). \quad (\text{II.9})$$

Ensuite, l'expression suivante peut être utilisée pour décrire la raccordement des atomes:

$$|u\rangle=(|irr\rangle,|rac\rangle)=[Mr](|irr\rangle|R,T))+|IH\rangle \quad (\text{II.10})$$

Le système 2 est trouvé en multipliant le système (7) par la matrice de défauts M_d .

$$[Md] \cdot |u\rangle = [Md] \cdot (I \cdot (|irr\rangle, |rac\rangle)) = [Md] \cdot [Mr] \cdot (|irr\rangle |R, T\rangle) + [Md] \cdot |IH\rangle. \quad (II.11)$$

Cela peut se résumer comme suit :

$$[Md] \cdot [Mr] \cdot (|irr\rangle |R, T\rangle) = [Mp] \cdot (|irr\rangle |R, T\rangle) = -[Mp] \cdot |IH\rangle, \quad (II.12)$$

et on en déduit que

$$(|irr\rangle, |R\rangle, |T\rangle) = -[Mp] - I \cdot [Md] \cdot |IH\rangle. \quad (II.13)$$

Les coefficients de transmission et de réflexion, ainsi que la conductance phononique, peuvent être calculés à l'aide du système (13). En normalisant les vitesses de groupe, les coefficients de réflexion et de transmission peuvent alors être calculés. Ces vitesses conservent l'énergie et donnent la somme des parties réfléchies et transmises égale à 1. La réflexion coefficiente pour les ondes provenant du côté gauche du défaut selon les modes propres est donnée par:

$$r_{vv} = (v_{g_v}' / v_{g_v}) |R|^2. \quad (II.14)$$

.

Le coefficient de transmission est donné par :

$$t_{vv} = (v_{g_v}' / v_{g_v}) |T|^2, \quad (II.15)$$

où

v_{g_v} est le mode et v est la vitesse de groupe et s'annule pour les modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits. En effet, les modes évanescents sont nécessaires pour une description complète de la dynamique vibrationnelle et pour la diffusion des phonons dans les guides d'ondes cristallographiques bien qu'ils ne contribuent pas au transport d'énergie. Alors la transmittance du système est définie par la relation suivante :

$$\sigma v = \sum v' t_{vv}'. \quad (II.16)$$

Les coefficients de transmission et de réflexion sont représentés par les courbes illustrées aux figures 6 à 11.

II.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion

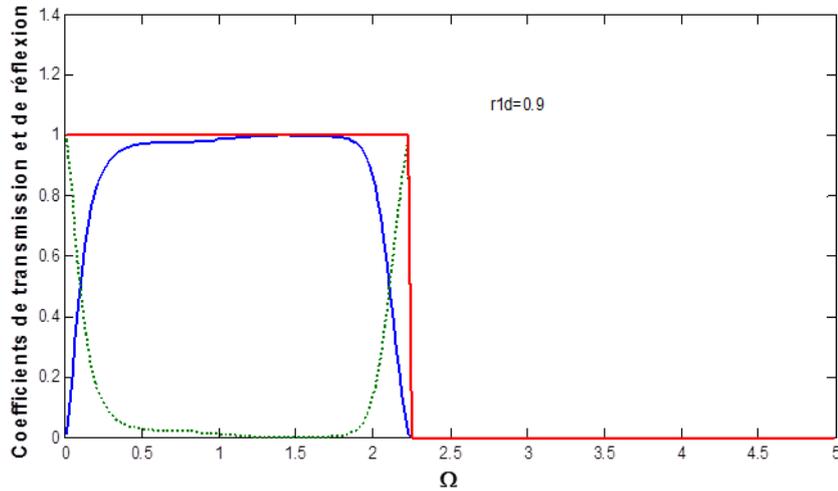


Figure II.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.

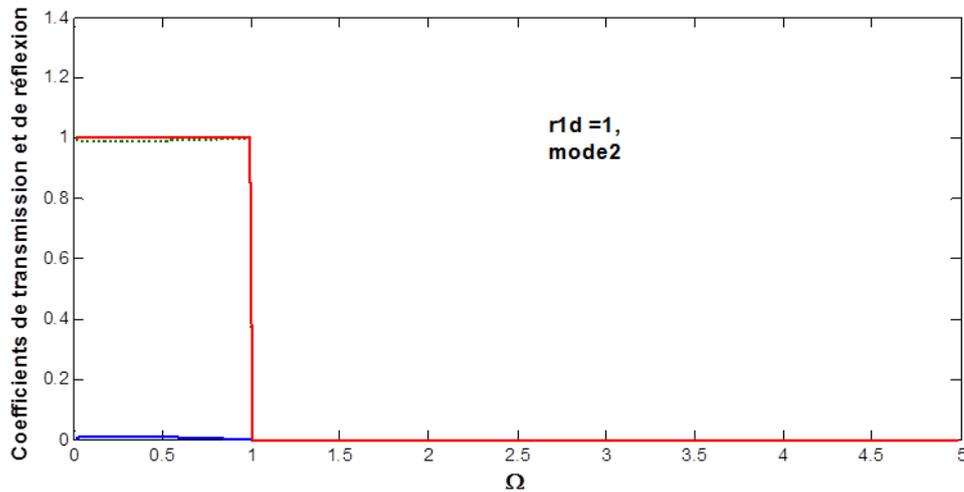


Figure II.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène .

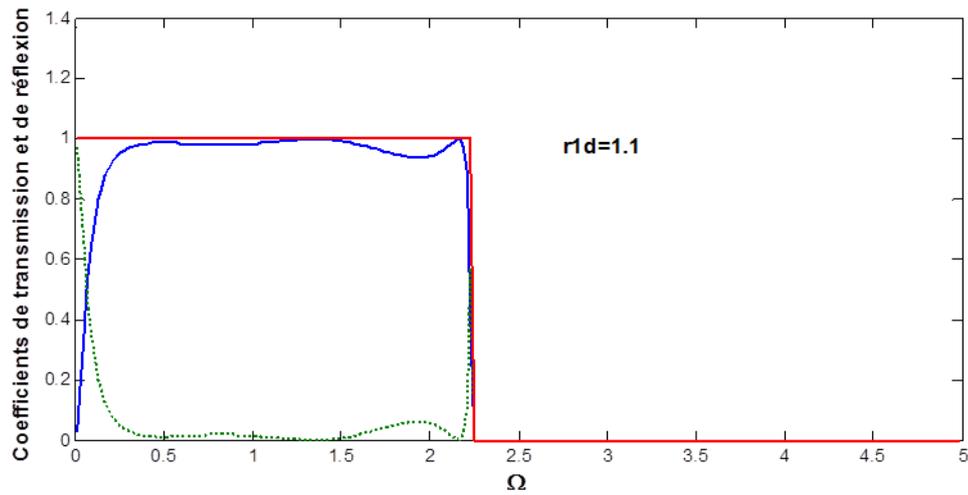


Figure II.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement .

II.4.2. Conductance phononique

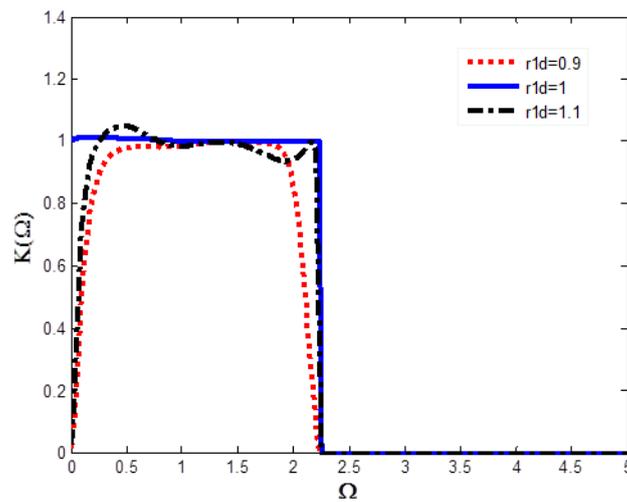


Figure II. 9. Conductance phononique ou transmittance en fonction de la fréquence sans dimension Ω et des constantes élastiques du système perturbé.

II.4.3. Etats localisés

Les défauts affectent les différentes propriétés du système et créent des états localisés dans son voisinage qui n'existent pas dans le volume. Le défaut entraîne des états localisés directement liés à sa nature, sa géométrie et sa modélisation. Ainsi le nombre de branches localisées est également lié au nombre de sites qui la décrivent. Pour déterminer les états localisés au voisinage de cette inhomogénéité, on applique l'équation dynamique de Newton au nombre minimum de sites la décrivant, ce qui nous donne une matrice de défauts M_d de dimension $(m \times n)$ rectangulaire pour laquelle on ne peut déterminer les états propres et les vecteurs propres où le nombre d'inconnues est supérieur au nombre d'équations. Une méthode adaptée est donc nécessaire pour résoudre le problème. Il existe plusieurs méthodes, dont la méthode mathématique sur laquelle se base notre travail. Celui-ci nous donne une matrice de raccordement de dimension $(n \times m)$ dont le produit avec la matrice de défauts nous conduit à une matrice carrée, $M_d \times M_r = M_p$ de dimension $(n \times n)$ dont les valeurs propres nous donnent les états locaux par

$$\text{Det}(\Omega \cdot I - M_p(\text{rd1}, \text{rd2}, \exp(i\phi_y))) = 0. \quad (\text{II.17})$$

Le nombre de branches est de six dans ce cas de problème il est lié aux dimensions de la matrice carrée (6×6) . Les courbes des branches localisées sont présentées sur les figures

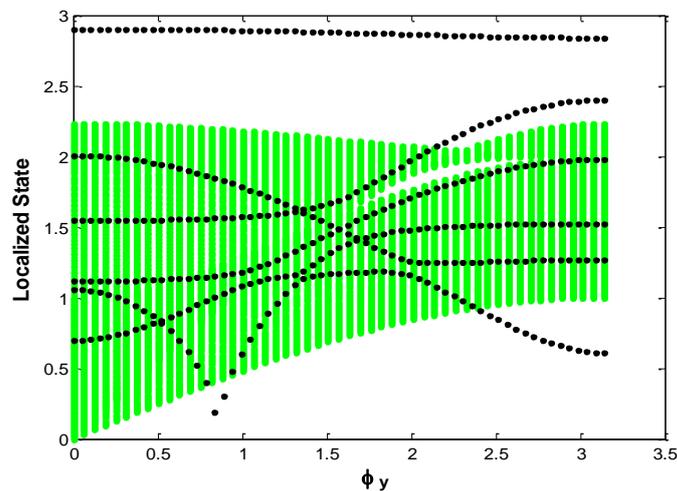


Figure II. 10. Etats localisée dans le cas du mode d'adoucissement.

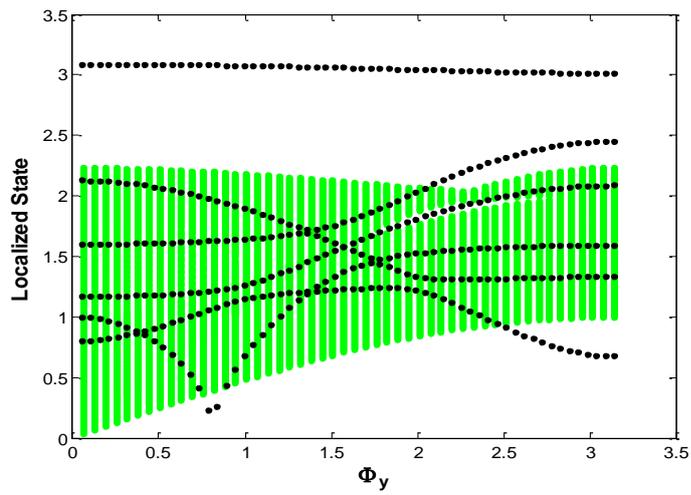


Figure II. 11. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

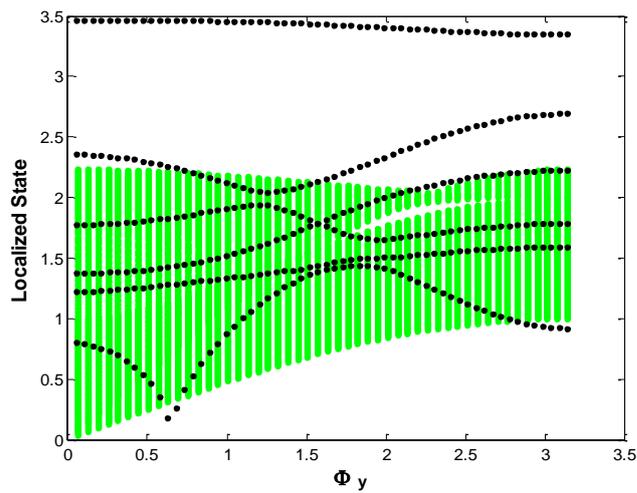


Figure II. 12. Etats localisés dans le cas du mode de durcissement

II. 4. 4. Densité d'état

L'une des grandeurs de base de tout système quantique est la densité d'états (DOS), et sa détermination est essentielle pour déterminer les propriétés physiques d'un système (comme sa capacité thermique). De plus, c'est une grandeur cruciale en physique expérimentale car elle est directement mesurable par la diffusion inélastique des neutrons.

Comme pour les électrons, il est possible de définir une densité d'états phononiques, définie par le fait que la quantité est le nombre d'états (modes) dans le domaine fréquentiel par cellule unitaire du matériau (système) étudié. Dans l'ensemble, la densité d'états (DOS) par site est strictement la même sur tous les sites. En revanche, les sites présentant un défaut dans le système actuel ont des environnements atomiques différents, et ils présentent donc différentes densités d'états locales (VLDOS) en fonction des sites. Dans ce travail, la manière la plus directe de calculer la vibration (VLDOS) au voisinage du défaut, consiste à utiliser un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de Green et le formalisme PFMTmatching. L'opérateur de Green G , obtenu à partir de la matrice carrée (Mp) du système, peut être exprimé sous la forme suivante

$$G(\varphi_x, \varphi_y, \Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - Mp(rd_1, rd_2, r_2, \exp i \varphi_y, \exp i \varphi_x)]^{-1} \quad (\text{II.18})$$

Où Ω est la fréquence normalisée, est une petite partie imaginaire ajoutée pour éviter les divergences dans les calculs, et (ϕ_x, ϕ_y) sont les facteurs de phase le long des directions y et x dans la zone de Brillouin dans la plage $[-\pi, \pi]$. est le facteur de phase défini précédemment et sont les constantes élastiques du système. la matrice de densité spectrale pour un vecteur d'onde sur la surface, est donnée par la relation suivante

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(l,l')}(\phi_x, \phi_y, \Omega, Z) = \sum_m C_{\alpha m}^l \cdot C_{\beta m}^{l'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} G_{\alpha\beta}^{ll'}(\phi_x, \phi_y, \Omega + i\varepsilon)] \quad (\text{II.19})$$

Où l et l' représentent deux sites différents, α et β deux directions cartésiennes, et le α la composante du vecteur déplacement u pour la branche énergétique

Ω_m

ε : distribution de Dirac(16)

La densité locale d'état LDOS (Local Density of States) sur le site l notée correspond à la somme du et de la trace des matrices de densité spectrale ; peut alors s'écrire

$$G_l(\Omega) = \sum_{l\alpha} \sum_{\phi_x, \phi_y} \rho_{(\alpha, \alpha)}^{(l, l)}[\Omega, Z, \phi_x, \phi_y] = -\frac{1}{\pi} \sum_{l, \alpha} \sum_{\phi_x, \phi_y} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} G_{\alpha\alpha}^{ll}(\phi_x, \phi_y, \Omega + i\varepsilon)] \quad (\text{II.20})$$

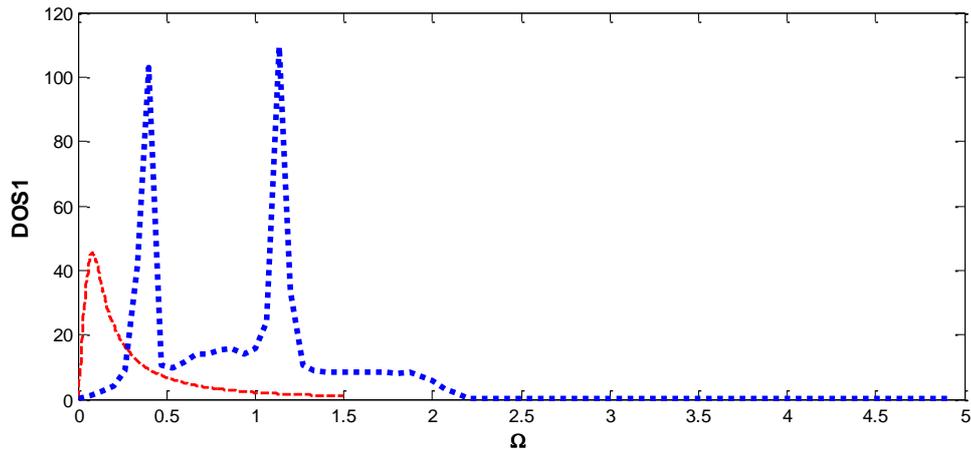


Figure II. 13 .Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω

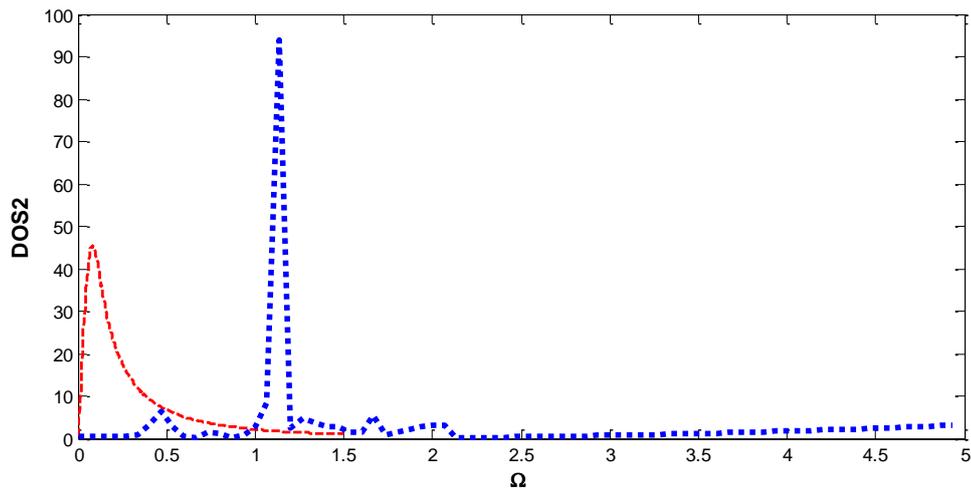


Figure II. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω

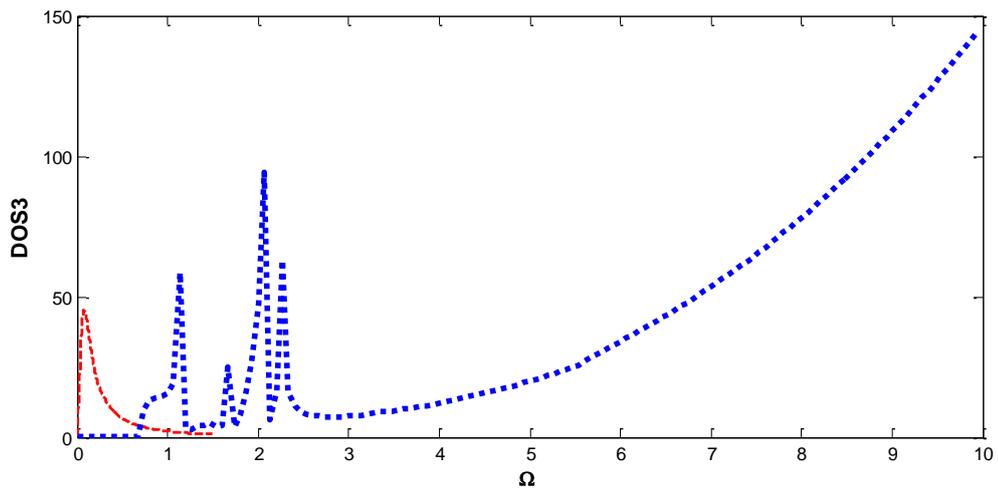


Figure II. 15. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω

II.5. Diffusion (une couche mince deux plans insérées)

II.5.1. Coefficients de transmission et de réflexion

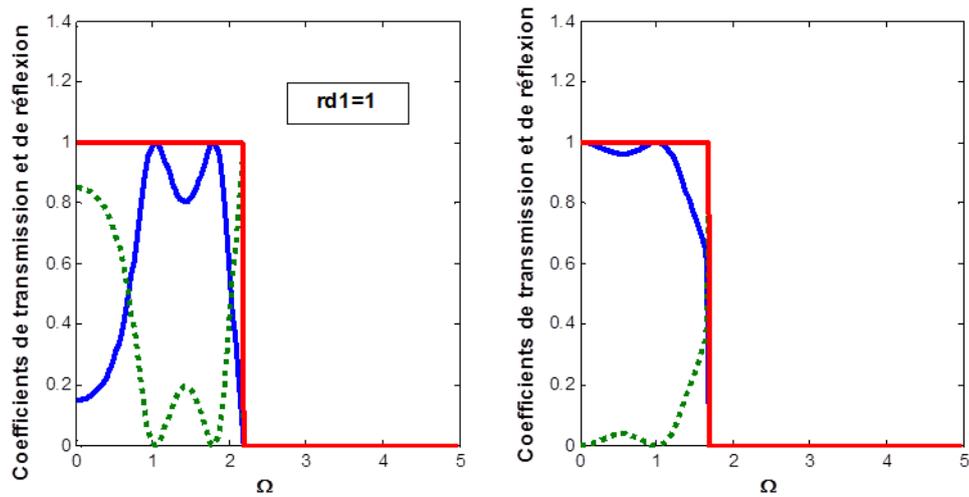


Figure II.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène

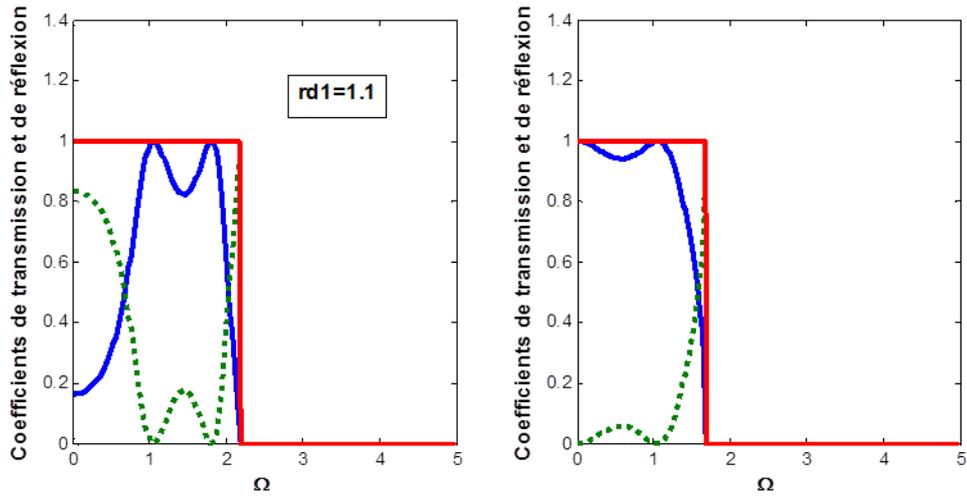


Figure II.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement

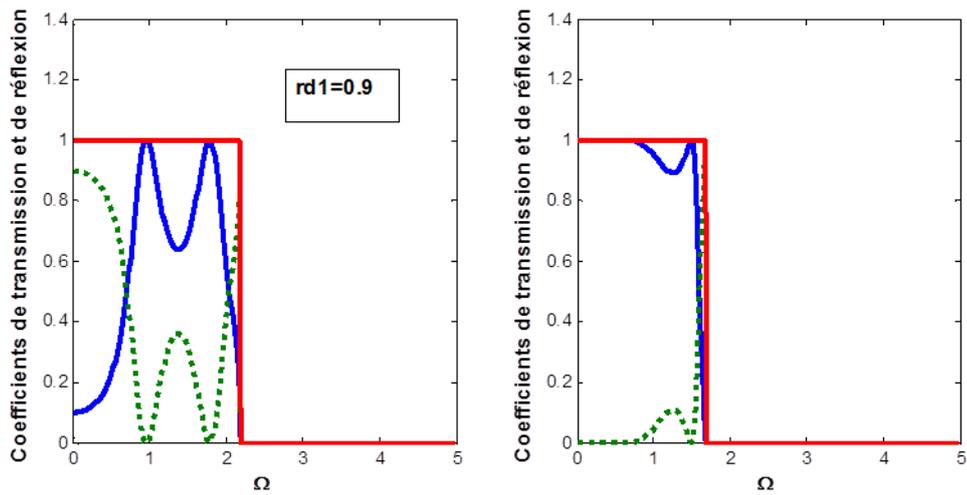


Figure II.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement

II.5.2. Conductance phononique

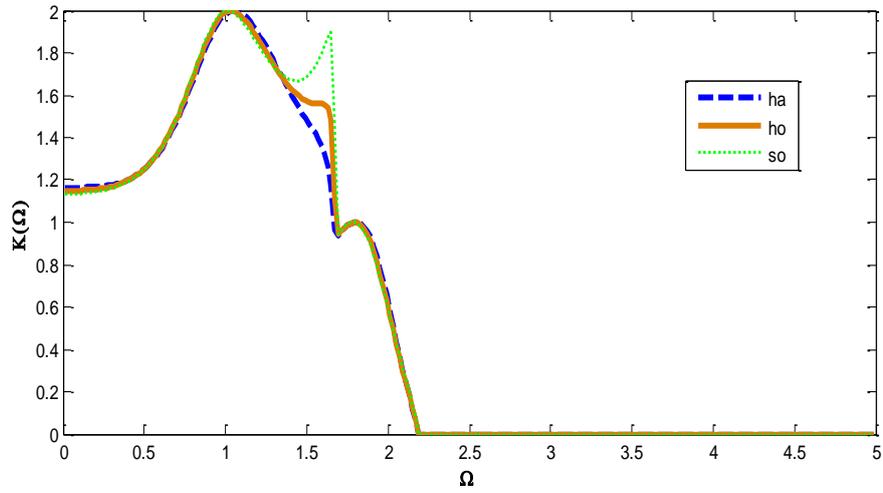


Figure II. 19. Conductance phononique ou transmittance en fonction de la fréquence sans dimension Ω et constantes élastiques du système perturbé.

II.5.3. Etats localisés

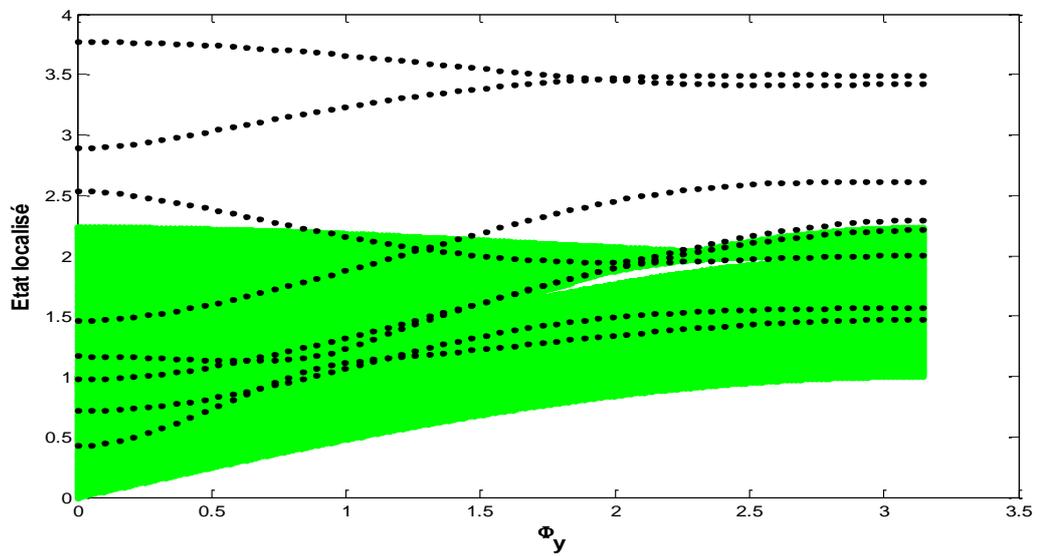


Figure II. 20. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.

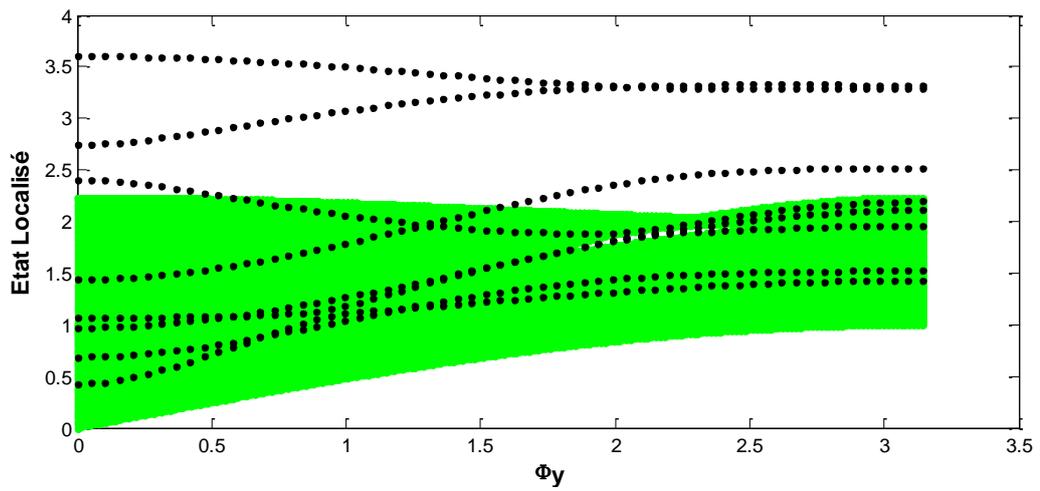


Figure II. 21. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

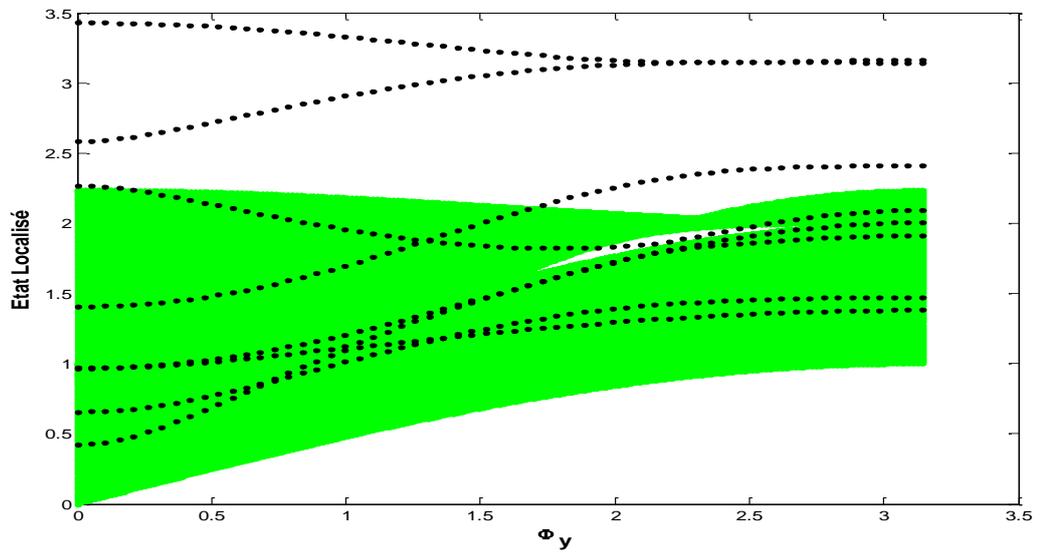
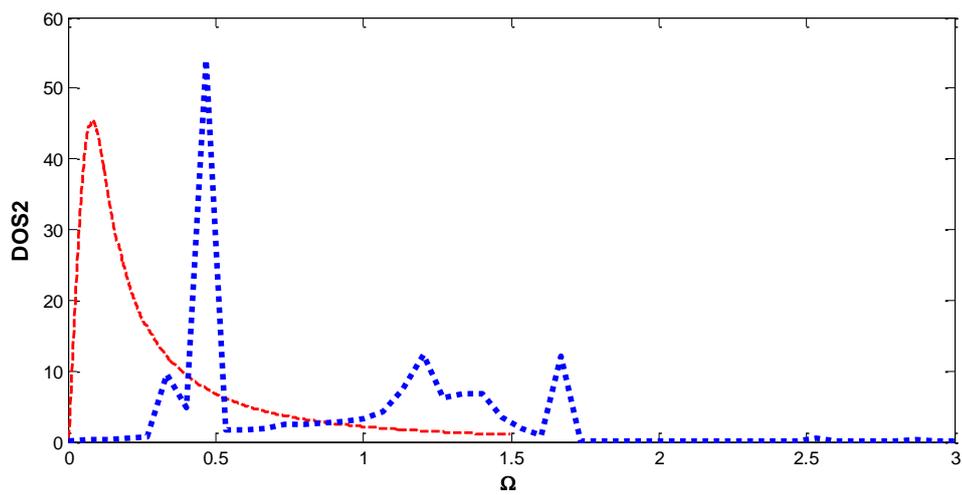
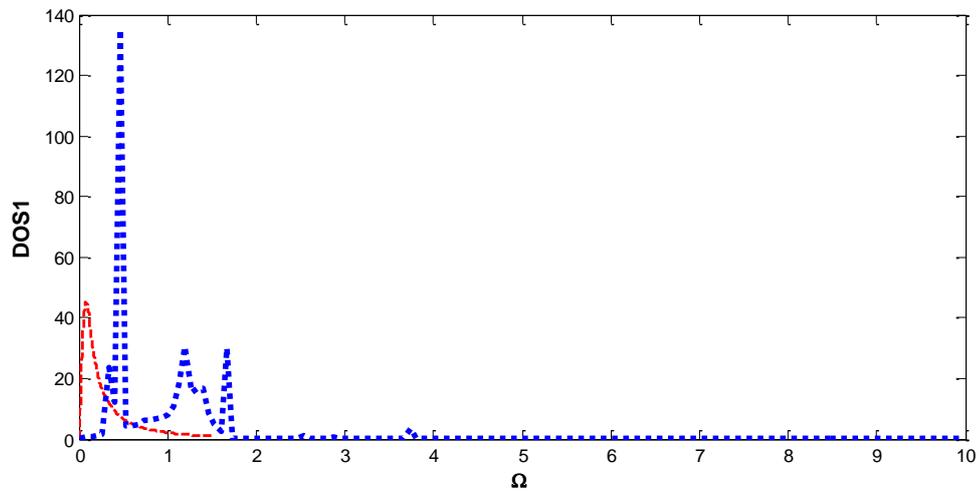


Figure II. 22. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

II. 5. 4. Densité d'état



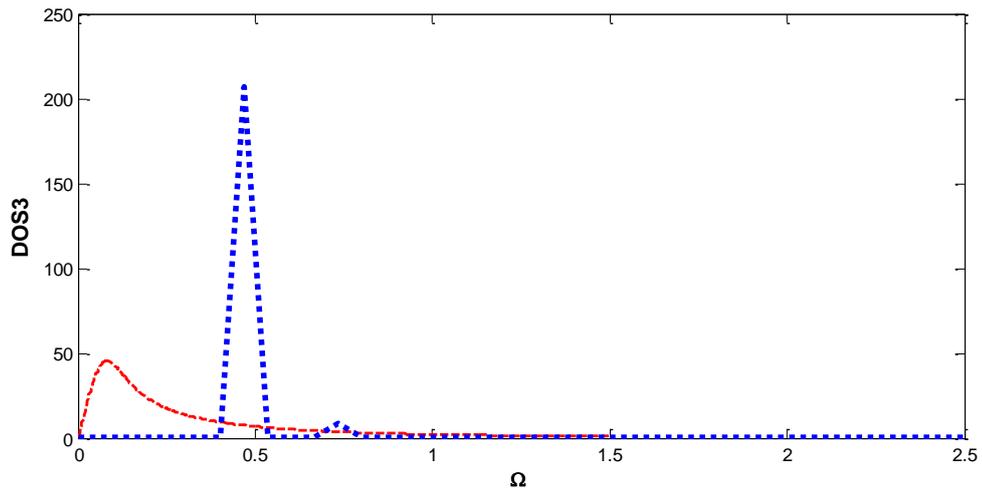


Figure II. 25. Densité d'état pour atome 3 en fonction.

II.6. Diffusion (une couche mince trois plans insérées)

II.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion

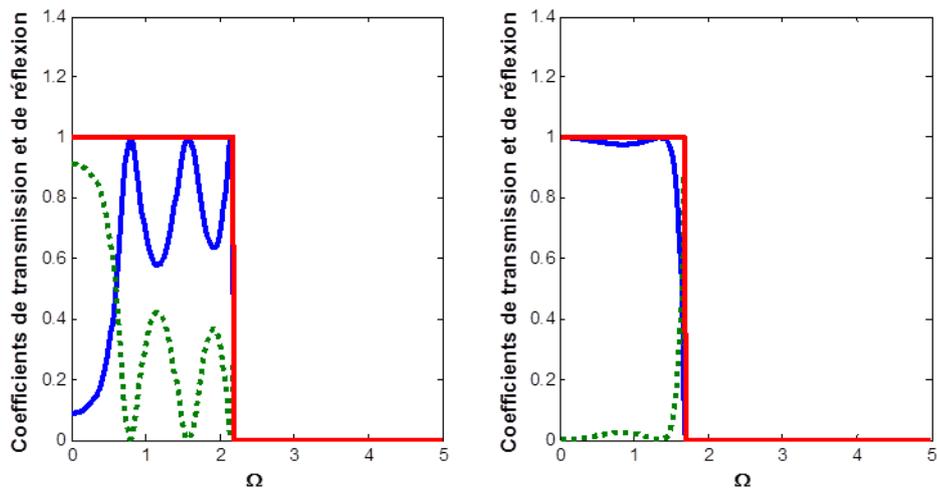


Figure II.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement

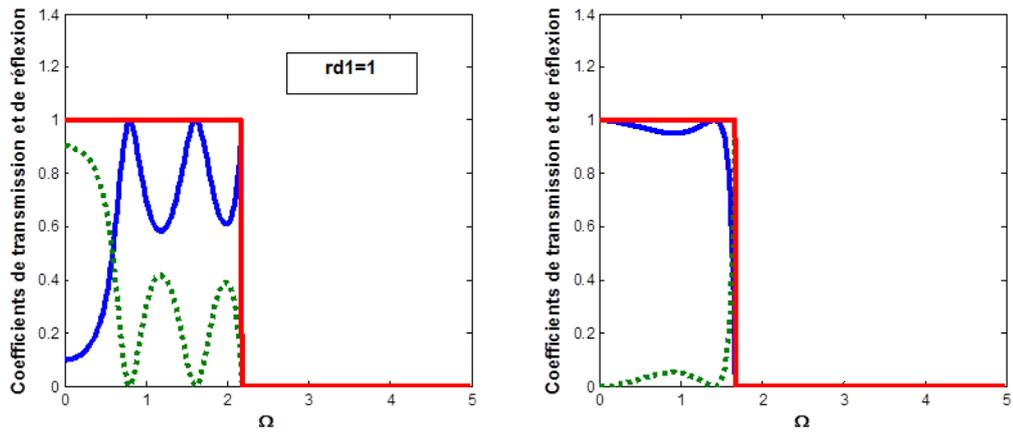


Figure II.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

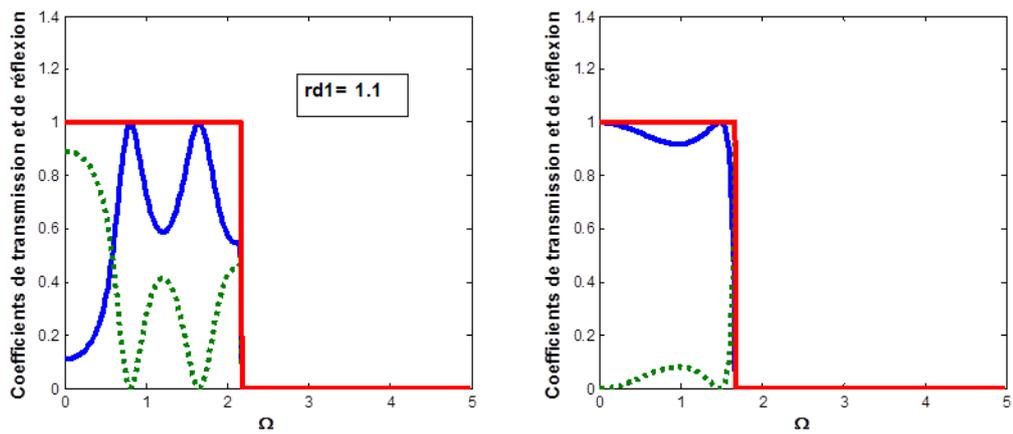


Figure II.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement

II.6.2. Conductance phononique

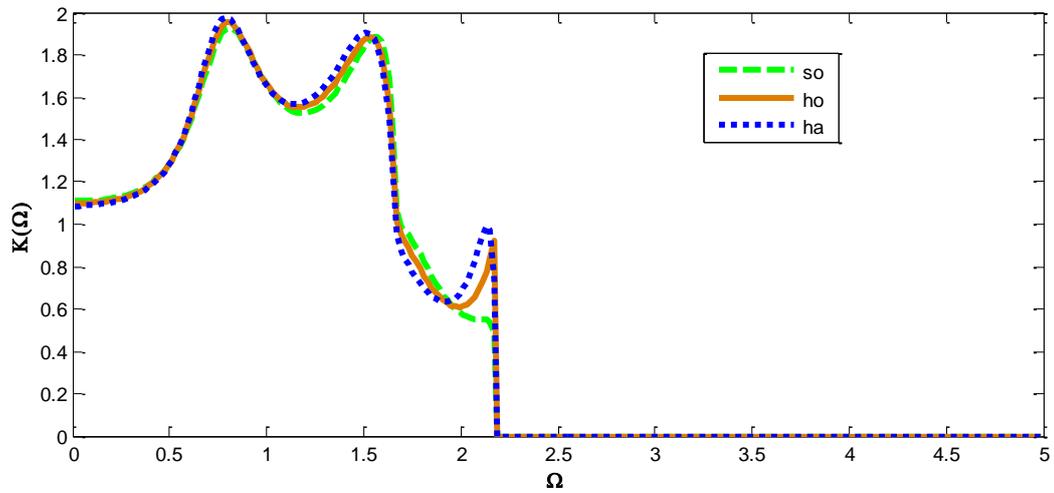


Figure II. 29. Conductance phononique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et constante élastique du système perturbé.

III.6.3. Etats localisés

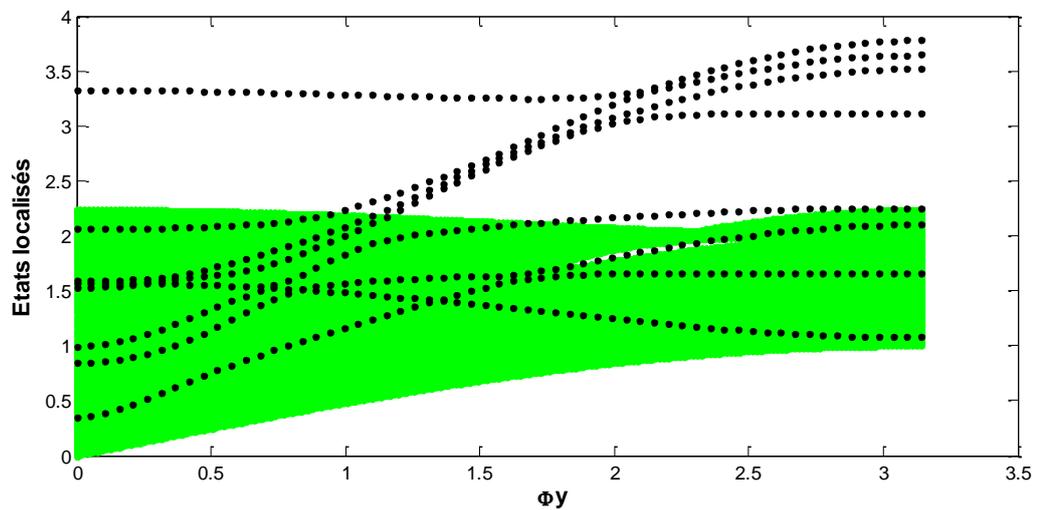


Figure II. 30. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement

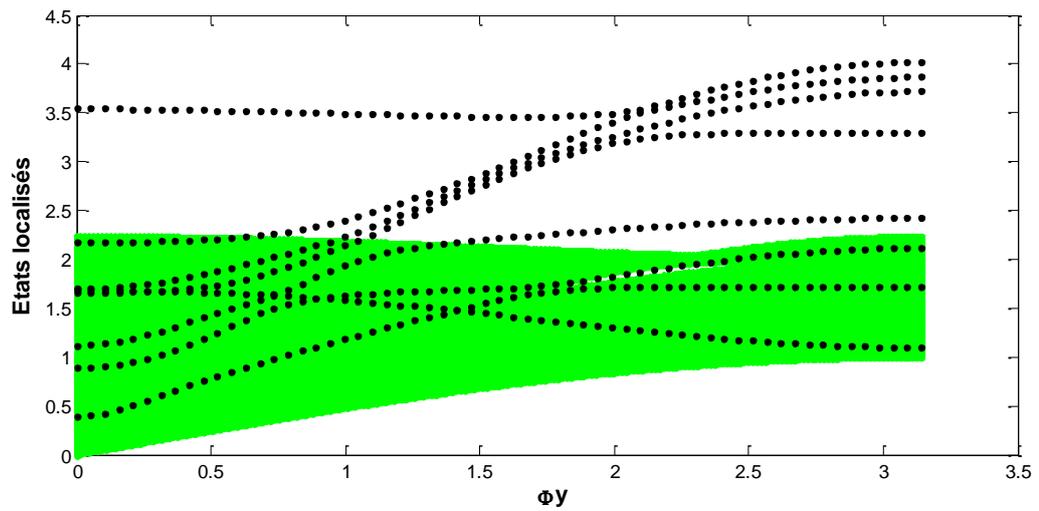


Figure II. 31. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

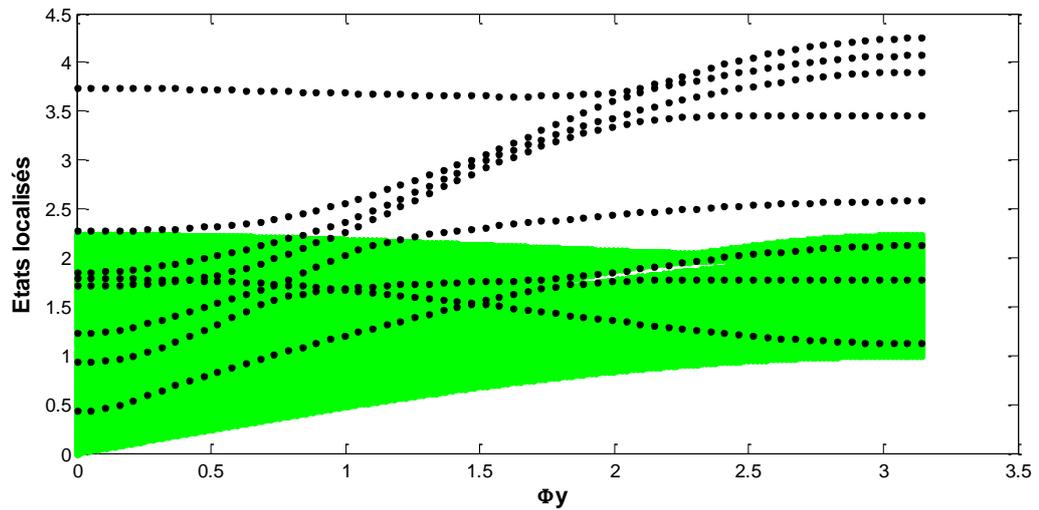


Figure II. 32. Etats localisés dans le cas du mode durcissement

II.6.4. Densité d'état

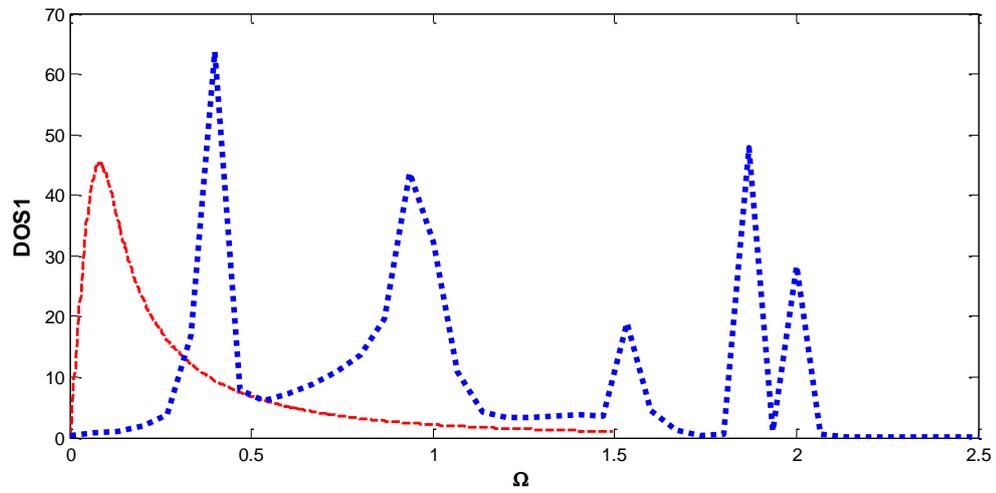


Figure II. 33. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω

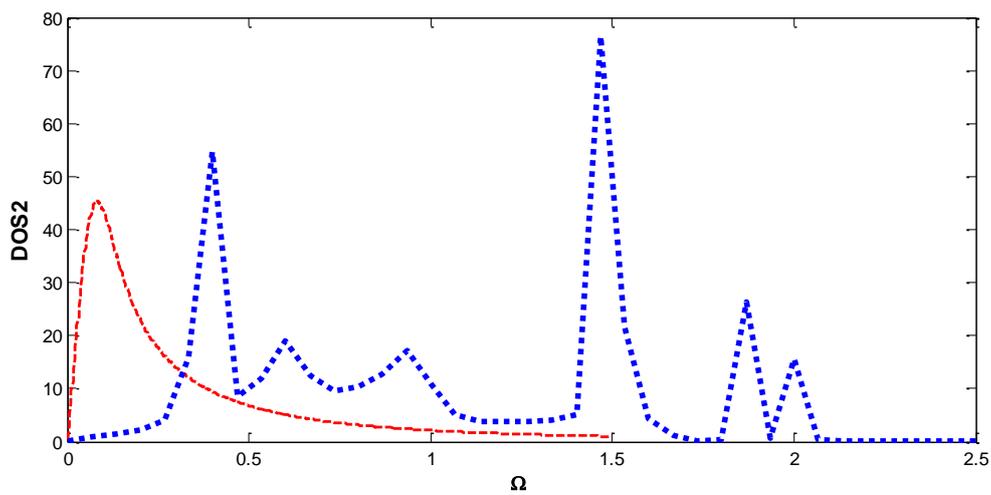


Figure II. 34. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω

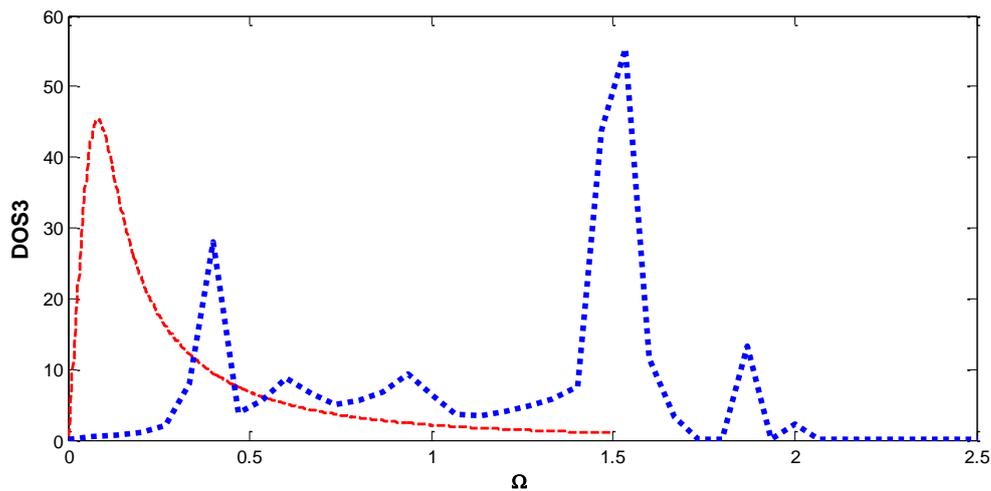


Figure II. 35. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω .

II. 7. Résultats et discussions

Pour une couche mince un plan insérée pour les trois possibilités (adoucissement, homogène et durcissement), les résultats numériques relatifs aux coefficients de transmission et de réflexion en fonction des fréquences normalisées Ω sont tracés sur les figures (5, 6 et 7). Il est observé qu'il existe un seul mode de vibration. Ce dernier est obtenu lors de l'étude dynamique de système. On peut noter, en première remarque, une dépendance exponentielle de l'amplitude des facteurs de phase évanescents en fonction de la fréquences sans dimension Ω . Physiquement, cela signifie que plus la fréquence d'excitation est élevée, plus l'atténuation des modes évanescents, caractérisés par le défaut est forte. On peut aussi remarquer, d'autre part, que les facteurs de phase $Z_i < 1$ avec ($i = 1, 2$) décrivent des modes évanescents uniquement lorsque la fréquence de l'état vibrationnel est en dehors d'une bande passante dont la largeur varie en fonction du rapport des constantes de force r_2 et de l'angle d'incidence Φ . Pour une fréquence appartenant à la bande passante des phonons de volume du système, les facteurs de phase ont un module égal à un pour les deux modes et se propagent. Pour avoir une vue complète des relations de dispersion, incluant les deux modes, les modes propagatif et atténué, il est intéressant de représenter sur un graphique 3D les trajectoires parcourues dans le plan complexe par les facteurs de phase Z en fonction de la fréquence normalisée Ω . Pour une valeur fixe de $r_2 = 0,25$, on peut donc calculer le Z correspondant ; et ces solutions peuvent être représentées sur une courbe (pour les modes propagatifs) et à l'intérieur (pour les modes évanescents) d'un cercle unité du plan complexe.

La figure 4 présente de telles courbes pour les différents modes 1 et 2 dans le cas d'une incidence $\phi_y = 0$ et $r_2 = 0,25$.

Nous avons calculé les bandes passantes globales des phonons pour le rapport des constantes de force $r_2 = 0,25$ dans le cas d'un léger défaut de masse ($e = 0,3$). Les calculs numériques de l'équation (2) dans l'espace $\{\omega, (\Omega, \phi_y)\}$ pour différentes valeurs du rapport des constantes de force au voisinage du défaut, respectivement en adoucissement, homogène et dur dans le cas d'une masse légère ($e = 0,3$), montrent également l'existence de phonons situés sur le défaut, dont les courbes de dispersion se superposent aux bandes passantes des phonons de volume sur les figures . A noter que le nombre et les caractéristiques de ces courbes de dispersion de phonons localisés dépendent fortement des valeurs des paramètres élastiques au voisinage du défaut.

Sur la figure, les bandes passantes des modes globaux sont représentées, ainsi que les courbes de dispersion des phonons localisés. On remarque que pour un défaut de rapport masse légère ($e = 0,3$), lorsque le rapport des constantes de force r augmente, cela engendre un espacement des branches des phonons localisés. Cette situation est représentée sur les figures dans le cas d'une incidence $\phi_y = 0$. Elles montrent l'évolution de la fréquence des phonons situés en bordure de la zone de Brillouin en fonction des paramètres élastiques au niveau du défaut appelé modes optiques. On remarque également qu'avec la modification des constantes de force, on arrive à des situations où des phonons localisés sont générés dans la fenêtre de bande de volume. Ici aussi, la nature des embranchements est liée à ces paramètres au voisinage de la zone perturbée. Dans ce travail, nous avons également calculé les coefficients de transmission et de réflexion pour les deux modes 1 et 2 pour les trois cas de constantes de force au voisinage du défaut adoucissant, homogène et dur. Ils sont très sensibles à leurs variations, notamment à la transmission, qui diminue en fonction de l'augmentation des constantes élastiques au voisinage de l'inhomogénéité. En revanche, la résistance augmente. Le nombre de branches est directement lié à la dimension de la matrice carrée, qui dans notre cas est de six. De plus, la transmittance du système, qui est la somme des transmissions de chaque mode, présente des fluctuations de Fabry Perrot dues à l'interférence des modes incident et réfléchi ainsi que des résonances de Fanon dues à l'interaction des modes situés au voisinage de le défaut et ceux du gros.

Les densités d'états associées aux états localisés calculées à l'aide de l'opérateur de Green sont représentées sur les Figs.(33-35). Leur forme est rugueuse en raison des fluctuations des résonances de Fano induites par l'interaction des états de volume et des états localisés. Nous nous intéressons aux densités minimales d'état du site décrivant les défauts. Dans notre cas, la zone perturbée contient 6 sites pour lesquels nous avons calculé la densité en fonction de l'énergie incidente et des paramètres au voisinage du défaut.

Dans ce travail, les propriétés génériques de la diffusion phononique au niveau d'une nanostructure intégrée dans un modèle de système inhomogène sont étudiées par la technique d'appariement dans l'approximation harmonique. Les résultats montrent que la conductance du système et les coefficients de réflexion et de transmission varient sensiblement avec les fréquences sans dimension et les paramètres du défaut élastique atomique. Aux fréquences plus basses, la conductance commence à sa valeur maximale, diminue avec l'augmentation de Ω et disparaît à la limite de la zone Brillouin. Ces spectres peuvent apporter, d'un point de vue théorique et expérimental, des informations utiles concernant les paramètres élastiques au voisinage du défaut et sa nature spécifique. Les spectres de conductance peuvent ainsi être utilisés pour identifier et étudier les défauts de nanostructures spécifiques, puis être utilisés pour leur caractérisation. Nous espérons que ces résultats pourront être vérifiés dans un ensemble d'expériences facilement réalisables. De tels systèmes peuvent trouver des applications utiles dans la conception de transducteurs et de dispositifs de contrôle antibruit (filtres à ultrasons), alors que les résonances sont couramment utilisées pour construire des filtres de fréquence.

Références bibliographiques

- [1] Rabah Chadli, *Modélisation théorique de la dynamique vibrationnelle des couches ultra minces des surfaces alliages métalliques ordonnées avec applications aux systèmes de surfaces*, Thèse de Doctorat .Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou(2012).
- [2] B. Bourahla, *Etude dynamique des nanocontacts*, Thèse de Doctorat .Rabah Chadli. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou(2007).
- [3] R .Landauner, *Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance*, J.Phys: codensed Matter 1,8099(1989)
- [4] C. Kittel, *Introduction à la Physique de l'Etat Condensé*, Dunod édition (1995)
- [5] H. Poulet et J. P. Mathieu, *Spectre de Vibration et Symétrie des Cristaux*, Gordon & Beach :paris, Londres, New York, (1990).
- [6] B. A. Ivanov, V. M. Murayov and D. D. Sheka, *Soliton-Magnon Scattering in Two-Dimensional Isotropic Ferromagnets*, J. Experimental and Theoretical Physics 89, 58 (1999).
- [7] M. Belhadi and A. Khater, *Spin Wave Modes And Magnon scattering at surface nanostructure on 2d heisenberg ferromagnets*, Surf. Rev. and Letters 11, 99 (2004).
- [8] R. Lai, S. A. Kislev and A. J. Sievers, Phys. Rev. B 56, N° 9 (1997)
- [9] P. Bôni, B. Roessli, D. Gôrlitz and J. Kôtzler, *Damping of spin waves and singularity of the longitudinal modes in the dipolar critical regime of the Heisenberg ferromagnet EuS*, Phys. Rev. B 65, 144434 (2002)
- [10] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss et I. Ipateva, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Supplement 3, Academic Press, New York and London (1971)
- [11] Thèse de doctorat d'état d'O. Rafil, Université du Maine, Décembre 1993
- [12] A. A. Maradudin, R. F. Walis, L. Dobrzynski, *Hand Book of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3, Garland, New York (1980)
- [13] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, ed. V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984)

- [14] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. De Wette, *Studies of Vibrational Surface Modes. I. General Formulation*, Phys. Rev. 4, 1648 (1971)
- [15] J. E. Black and P. Bopp, *The vibration of atoms at high miller index surfaces: Face centred cubic metals*, Surf. Sci. 140, 275 (1984).
- [16] A. Lock, J. P. Toennies, G. Witte, *Helium-atom scattering investigation of faceting of the Al stepped (332) surface*, J. Elec. Spec. & Related Phenomena, 54/55, 309 (1990).
- [17] P. Knipp, *Phonons on stepped surfaces*, Phys. Rev. B 43, 6908 (1991).
- [18] B. Bourahla, Mémoire de Magister, *Etude des excitations magnétiques des surfaces vicinales dans un système à deux sous-réseaux*, Université de TiziOuzou (2001).
- [19] S. Irene, Mémoire de Magister, Université de TiziOuzou (2001).
- [20] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater and M. Abou Ghantous, *Spin dynamics across an inhomogeneous atomic boundary separating ultrathin Heisenberg ferromagnetic films*, Eur. Phys. J. Phys 37, 25 (2007).
- [21] L. Dobrzynski, *Interface response theory of discrete composite systems*, Surf. Sci. Reports 6, 119 (1986).
- [22] L. Dobrzynski and D. L. Mills, *Vibrational properties of an adsorbed surface layer on a simple model crystal*, J. Phys. Chem. Solids 30, 1043 (1969).
- [23] P. Masri, G. Allan, L. Dobrzynski, *Perturbations de quelques propriétés vibrationnelles des surfaces cristallines par les marches*, J. de Phys. 33, 85 (1972).
- [24] G. Armand, *Generating coefficients of lattice Green's functions*, Phys. Rev. B 14, 2218 (1976).
- [25] G. Armand, *Détermination des grandeurs liées aux modes de vibrations d'un cristal. spectre de fréquence. Densité spectrale d'un atome de surface et déplacements corrélés moyens*, J. de Phys. 38, 989 (1977).
- [26] G. Armand and P. Masri, *Localized surface modes and resonances for vicinal surfaces: The (117) face of fcc crystals*, Surf. Sci. 130, 89 (1983).
- [27] F. Garcia-Moliner, *Étude des problèmes physiques de surface par le formalisme des fonctions de Green*, Ann. Phys. (Paris) 2, 179 (1977).

- [28] R. A. Allen, *A general green function method for calculating electronic structure and vibrational modes at surfaces*, Surf. Sci. 76, 91 (1978).
- [29] G. Treglia and M. C. Desjonqueres, *Bulk and surface vibrational and thermodynamical properties of fcc transition and noble metals : a systematic study by the continued fraction technique*, J. de Phys. 46, 987 (1985).
- [30] P. Knippel B. M. Hall, *Calculation of high resolution electron and helium energy loss cross sections using surface vibration spectral densities*, Surf. Sci. 224, 983 (1989).
- [31] A. Kara, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu et F. Ercolessi, *Local analysis of the dynamics of the relaxed and reconstructed Au(511) surface using the real space Green's function method*, Phys. Rev. Lett. 72, 2223 (1994).
- [32] E. J. Mele et M. V. Pykhtin, *Rayleigh Waves at Vicinal Surfaces, Rayleigh Waves at Vicinal Surfaces*, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [33] A. Kara, S. Durukanoglu et T. Rahim, Phys. Rev. B 53, 15489 (1995).
- [34] J. C. Slater : *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol (M. C. Graw-Hill, New York, London, 1965).
- [35] A. A. Maradudin et J. Melangalis, *Ground-State Energy of a High-Density Electron Gas*, Phys. Rev. A 133, 1118 (1967).
- [36] H. Grimech and A. Khater, *Calculation of the spectral densities of the surface alloy system (Pt_cCu_{1-c})/Cu(100)*, Surf. Sci. 323 (1995).
- [37] H. Grimech and A. Khater, *Mean surface phonon dispersion curves for low index fcc (A_cB_{1-c})B(klm) surface alloys*, Surf. Sci. 341 (1995).
- [38] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, *Dynamical properties of an isolated step*, J. Phys. Condens, Matter, 8, 7589 (1996).
- [39] R. Tigrine, Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri, (2004).
- [40] T. E. Feuchtwang, *Dynamics of a Semi-Infinite Crystal Lattice in a Quasiharmonic Approximation. II. The Normal-Mode Analysis of a Semi-Infinite Lattice*, Phys. Rev., 155, 731 (1967)

- [41] J. Szeftel and A. Khater, *Calculation of surface phonons and resonances: the matching procedure revisited: I*, J. Phys. C: Solid St. Phys. 20, 4725 (1987).
- [42] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addatoet N. Auby, *Calculation of surface phonon dispersion on Ni(100) and Ni(100)+c(2×2) along the (010) direction by means of the matching procedure. II*, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988).
- [43] A. Khater and W. Czaja, *Impurity-impurity interaction mediated by coherent phonons*, Physica B167, 33 (1990).
- [44] A. Khater, N. Auby, D. Kechrakos, *Surface-surface phonon scattering by surface inhomogeneities*, J. Phys: Condensed Matter 4, 3743 (1992).
- [45] A. Felly, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet, and A. Khater, *Scattering of vibrational waves in perturbed quasi-one-dimensional multichannel waveguides*, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [46] A. Felly, Rapport Master d'ingénieur physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996).
- [47] R. Landauer, *Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance*, J. Phys.: Condensed Matter 1, 8099 (1989).

Chapitre III

Propriétés magnétiques

III.1. Introduction

Les matériaux, en particulier leurs propriétés magnétiques, ont récemment reçu une attention particulière. Cela est dû à son large usage. Il est crucial de comprendre les propriétés magnétiques de ces matériaux. En fait, son importance est grande car elle permet de développer et d'améliorer les propriétés de ces matériaux et d'atteindre des domaines d'utilisation supplémentaires.

Ce chapitre se concentre sur le développement et l'application d'une méthode de simulation analytique et numérique pour étudier les propriétés magnétiques couplées entre deux ferromagnétiques de Heisenberg semi-infinis différents A et B, Avec des quantités comme les intégrales d'échanges et les spins qui distinguent ces deux milieux. Cette étude sera menée dans un cadre très simple où nous utiliserons l'équation de Heisenberg-Hamilton, pour décrire toutes les interactions entre les premiers voisins, en l'absence du champ magnétique total $B_T(m)$, c'est-à-dire que le champ appliqué et l'anisotropie du champ sont considérés comme nuls.

La méthode de calcul que nous avons adoptée dans cette étude est la “*la méthode de raccordement*”.

La plupart des recherches en nanophysique se concentrent sur les liens entre les propriétés physico-chimiques, la structure cristalline, la microstructure et la composition chimique (dopage) de ces matériaux. Le contrôle des hétérogénéités et des interfaces à l'échelle nanométrique est crucial pour contrôler ces propriétés.

Depuis les travaux originaux de J. Slonczewski et L. Berger [1,2], l'injection de spin comme mécanisme fondamental de l'inversion de l'aimantation dans les nanostructures a suscité un nombre insuffisant de recherches expérimentales ainsi que de nombreuses contributions théoriques de plusieurs auteurs. [5-7], en étudiant le transport magnétique et les phénomènes spécifiques au voisinage de l'interface, dépendent du spin, de la transmission et de la réflexion.

Dans l'industrie, ces nanostructures magnétiques peuvent être utilisées pour le stockage d'informations [8] ou pour les télécommunications optiques [9], de par leurs propriétés optiques et magnétiques exceptionnelles.

Les résultats sont donnés en tenant compte des nombreux paramètres définissant les deux systèmes semi-infinis. On constate que la transmission du magnon est proportionnelle à

la valeur des intégrales d'échanges de la structure B lorsque les ondes de spin de la structure semi-infinie A diffusent vers elle. Nous utilisons largement la méthode de raccordement et le modèle Heisenberg [10-14], qui permettent de calculer la localisation et le processus de diffusion des ondes de spin du domaine de contact (interface). La section 2 fournit une description détaillée du calcul dynamique de fluctuation de spin dans le guide d'onde idéal et le modèle d'interface ferromagnétique. La base théorique du calcul des magnons localisés à proximité de l'inhomogénéité de spin est présentée dans la section 3. Le problème de diffusion, les principaux résultats numériques et les conclusions générales de chapitre sont présentés dans les résultats et discussions.

III.2. Description du modèle

III.2.1. Propriétés magnétiques en volume

Nous avons choisi les figures (III.1a-1c) ci-dessous comme systèmes modèles pour mettre en œuvre notre modélisation.

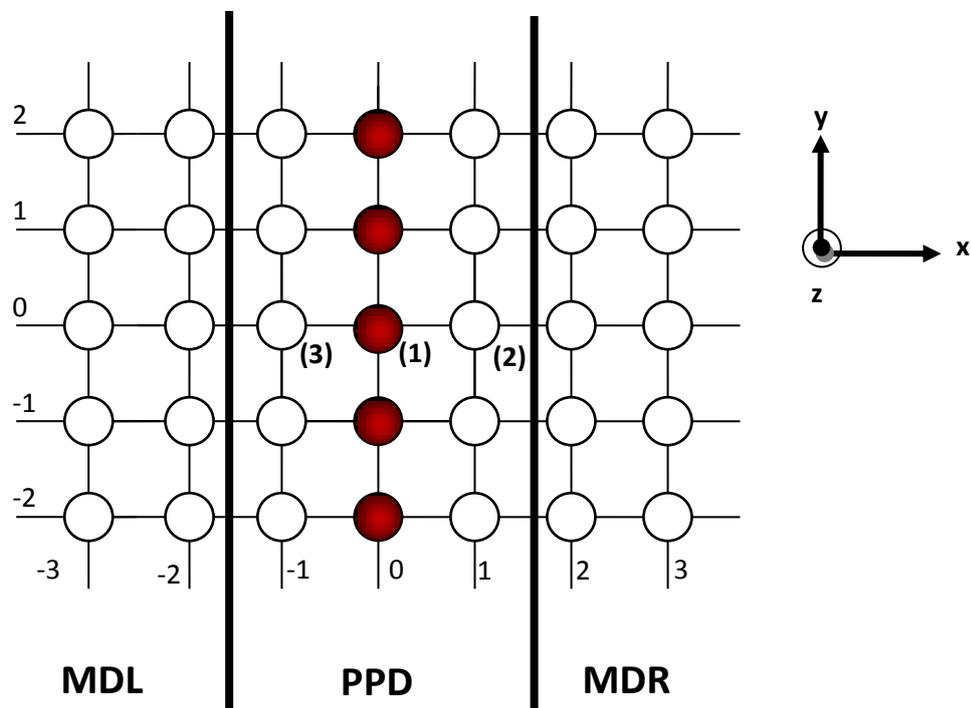


Figure III.1a. Représentation du couche mince pour un plan de défaut inséré

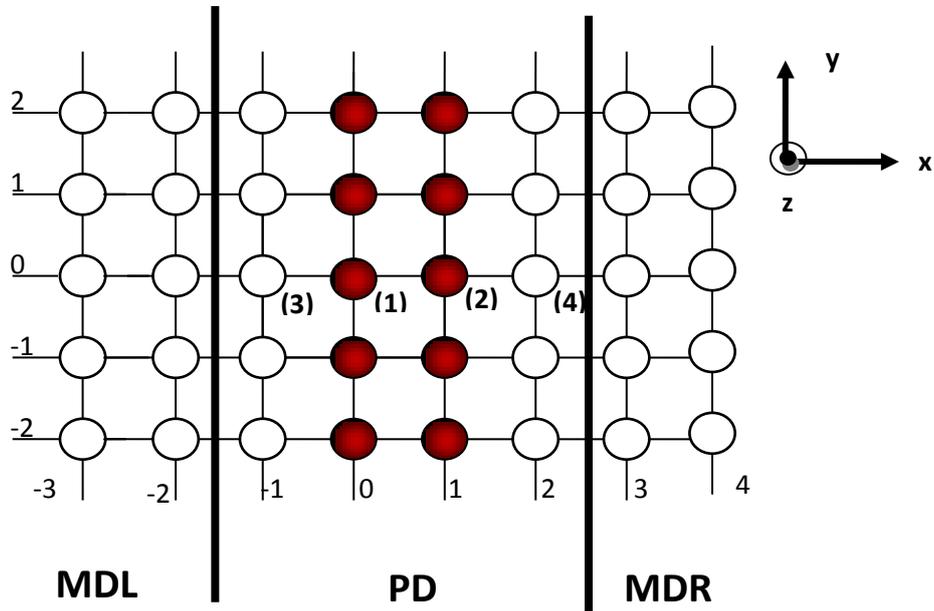


Figure III.1b. Représentation de la couche mince pour 2 plans de défaut insérés

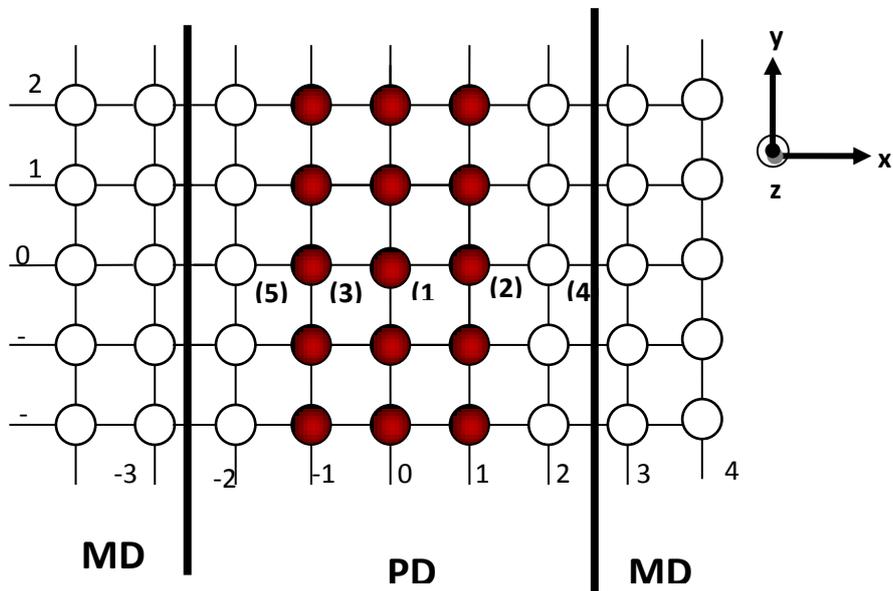


Figure III.1c. Représentation de la couche mince pour 3 plans de défaut insérés.

Bien qu'il soit prévu que les caractéristiques magnétiques des deux sous-couches diffèrent, nous simplifierons les choses en supposant que leurs structures cristallographiques sont les mêmes et en les appelant cubiques simples (CS).

Puisque les paramètres physiques d'un système A sont affectés par un plan B de paramètres physiques différents, cela entraîne une perturbation de la symétrie de translation dans la direction x. Par conséquent, le théorème de Bloch n'est pas applicable dans cette direction. La méthode de raccordement permet de combiner les équations du mouvement de précession des vecteurs de spin d'un système A avec un plan B afin de résoudre ce problème.

Le long de l'axe x, la symétrie de translation est brisée. La présence de l'interface magnétique en est la principale cause. En revanche, l'axe y présente une symétrie de translation et le théorème de Bloch est applicable dans cette direction.

Lors de notre étude, certains paramètres physiques (champ magnétique extérieur et champ d'anisotropie) n'ont pas été pris en considération. Il ne s'agit pas d'une décision aléatoire, mais plutôt d'une approche visant à diminuer les formulations mathématiques du problème et à faciliter le contrôle des divers paramètres du système qui sont impliqués dans le calcul des équations du mouvement de précession des spins. L'existence de l'interface magnétique perturbe l'échange d'énergie entre les spins, c'est pourquoi nous avons ajouté les paramètres d'échange suivants:

- J_{AA} : interaction d'échange entre les spins appartenant à la région de volume du film A.
- J_{BB} : interaction d'échange entre les spins appartenant à la région de défaut du film B.
- J_{AB} : interaction d'échange entre les spins appartenant à la région perturbée et celle de volume.

De plus, nous avons noté les quantum de spins des deux films A et B, par S_A et S_B . De plus, nous avons ajouté les paramètres suivants pour simplifier nos calculs numériques:

$$\gamma_1 = J_{AB} / J_{AA} \quad (\text{III.1})$$

$$\gamma_2 = J_{BB} / J_{AA} \quad (\text{III.2})$$

$$\gamma = S_B / S_A \quad (\text{III.3})$$

Ainsi qu'une énergie normalisée Ω donnée par :

$$\Omega = \hbar\omega / 2 J_{AA} S_B \quad (\text{III.4})$$

III.2.2. Branches de dispersion et facteur de phase

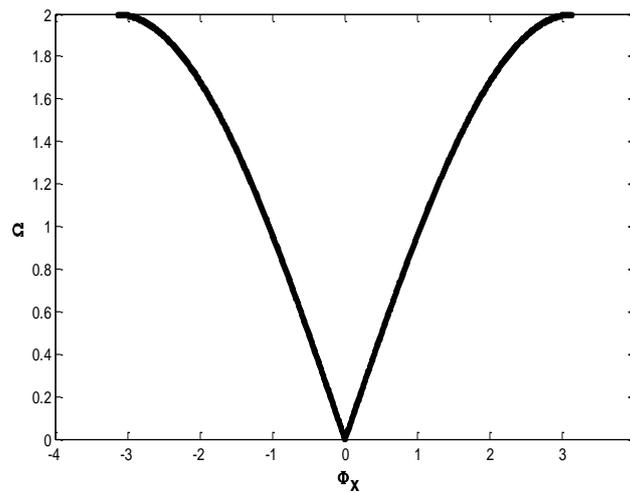


Figure III.2. Branches de dispersion de mode1 et mode2 en fonction du rapport ϕ_x et J_2 intégrale d'échange entre les premiers voisins

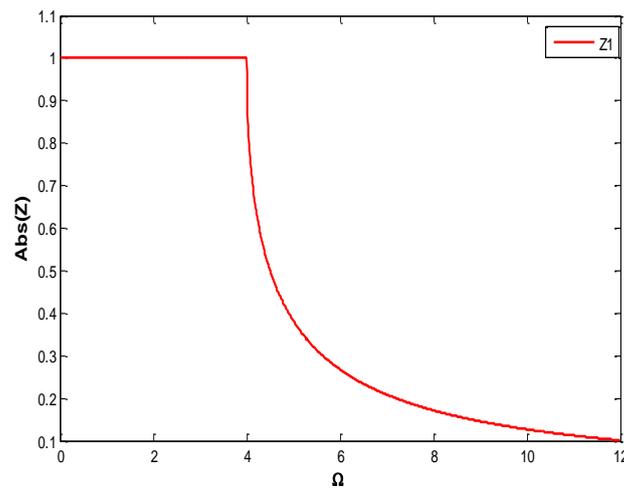


Figure III.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction de J_2 et de la fréquence sans dimension Ω .

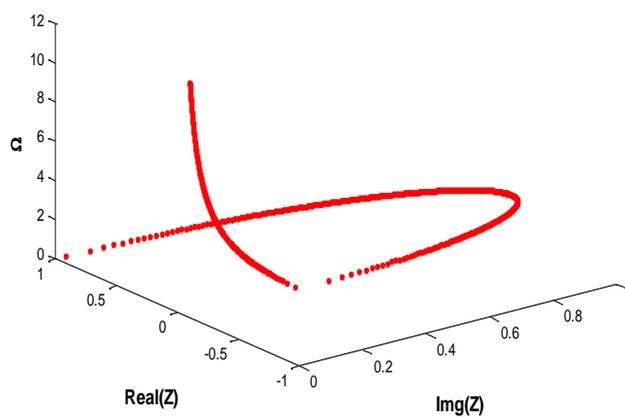


Figure III.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction J_2 (image Z et réel Z).

III.2.3. Vitesses de groupe

La vitesse d'une onde de rotation est la vitesse à laquelle le paquet d'onde se déplace. Pour le dire autrement, il s'agit de la vitesse à laquelle l'énergie est transportée et de la localisation de l'information dans le milieu. On peut utiliser l'expression suivante afin de déterminer des vecteurs d'ondes réels q :

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{Soit} \quad \vec{V}_g = \overrightarrow{\text{grad}}_q \Omega(\vec{q}) \quad (\text{III.5})$$

Nous imposons à la vitesse de groupe une valeur nulle et on écrit si le vecteur d'onde \vec{q} est complexe (non réel): $V_g = 0$.

Deux méthodes peuvent être utilisées pour calculer cette vitesse : La méthode des différences finies ou la méthode des perturbations sont utilisées pour le calcul. La fondation de ces deux méthodes est exposée en pièce jointe.1. Dans nos calculs, nous choisirons la deuxième méthode, qui repose sur la théorie des perturbations standard, qui est également employée en mécanique quantique. Cette méthode a été sélectionnée car elle intègre une étape analytique supplémentaire, ce qui la rend plus raffinée et plus précise que la première. Toutefois, il est nécessaire de réaliser quelques calculs supplémentaires en utilisant cette méthode. La vitesse de groupe obtenue par ce processus est représentée de manière explicite:

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} = - \vec{u}^t \frac{\partial M_d}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{III.6})$$

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

Dans les deux guides d'ondes parfaits des films A et B, les figures donnent l'allure des vitesses de groupe V_g pour les différents modes propres en fonction de l'énergie de diffusion Ω . En observant ces graphiques, il est clair que les courbes des vitesses de groupe des différents modes évoluent généralement de la même manière. Les figures montrent également des zones où les vitesses de groupe de divers modes se rencontrent. Cela implique que dans ces régions, les modes peuvent être entraînés en même temps.

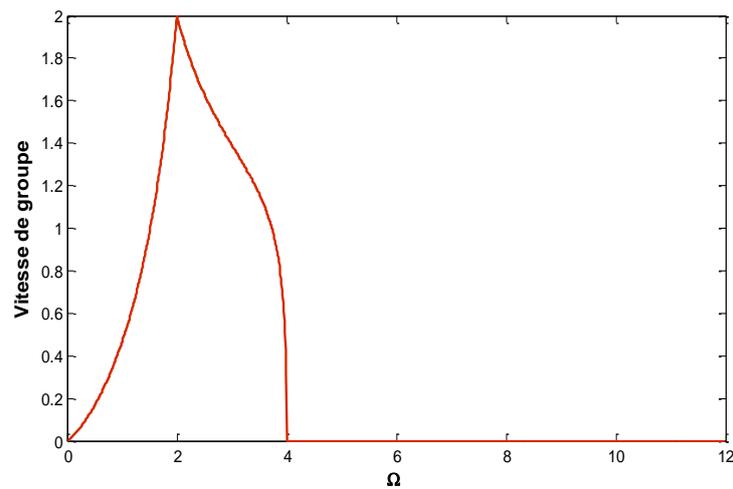


Figure III.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω .

III.2.4. diffusion (Une couche mince un plan insérée)

III.2.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion

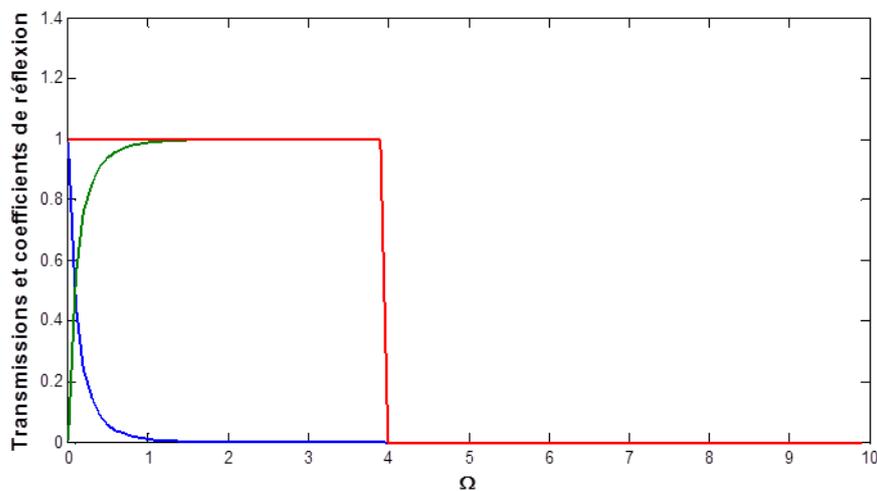


Figure III.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.

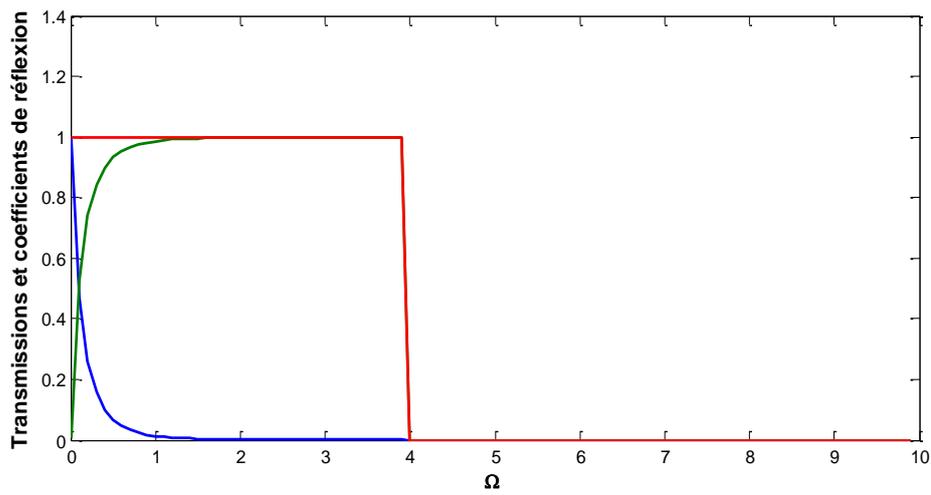


Figure III.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène

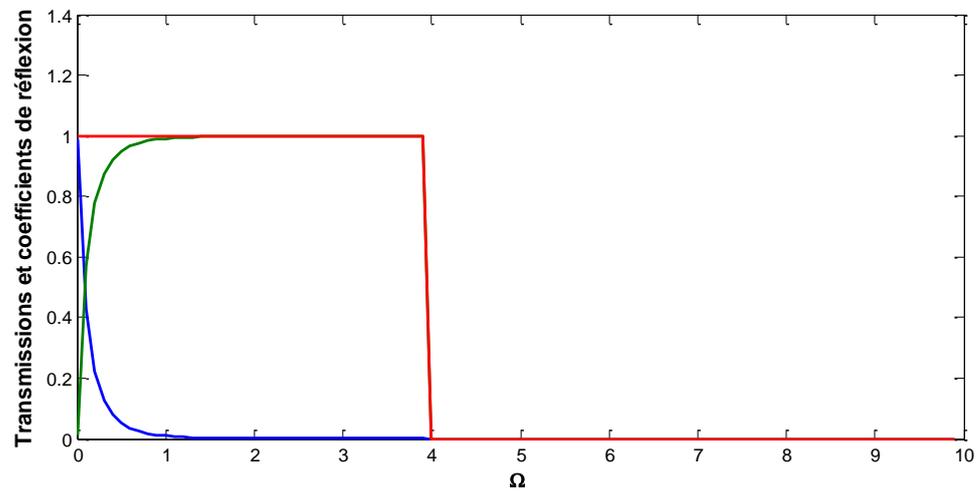


Figure III.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement.

III.2.4.2. Conductance magnonique

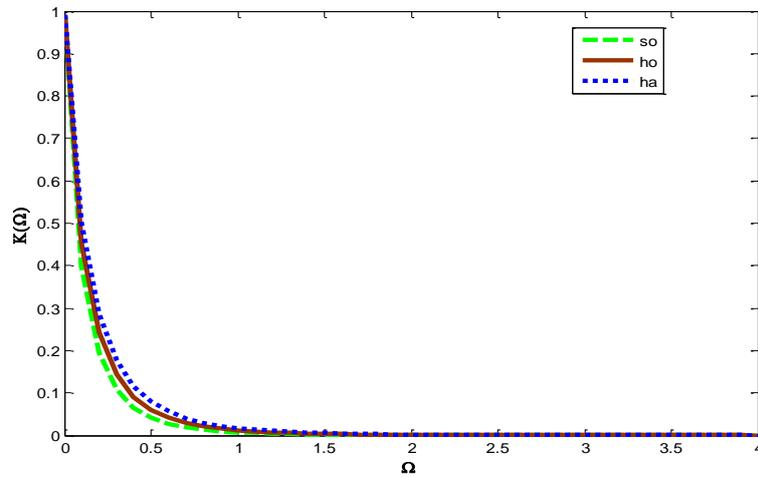


Figure III. 9. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction Ω intégrale d'échange entre les premiers voisins

III.2.4.3. Etats localisés

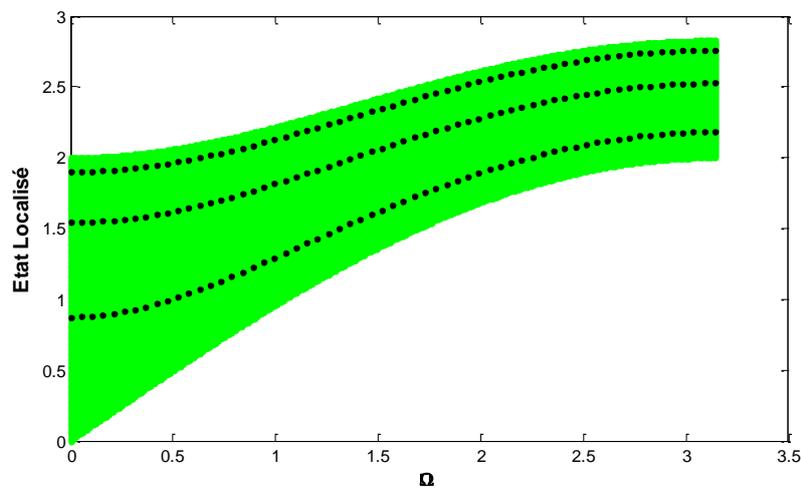


Figure III. 10 : Etats localisés dans le cas du mode durcissement.

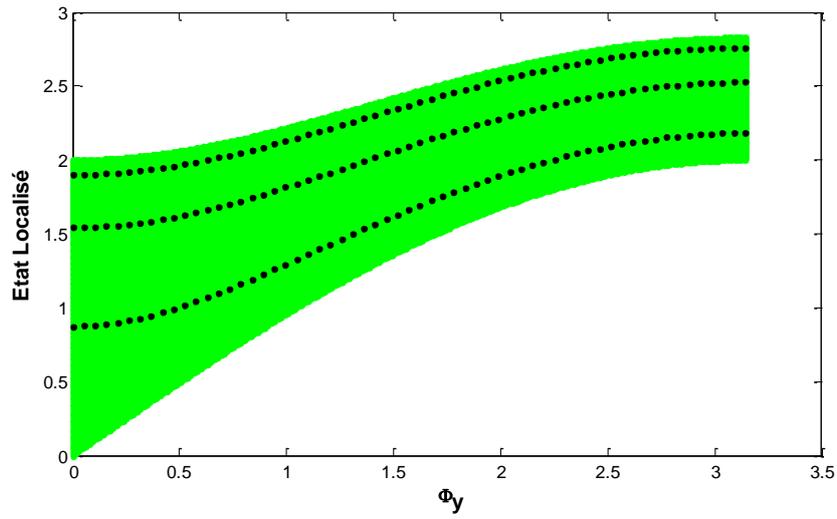


Figure III. 11. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

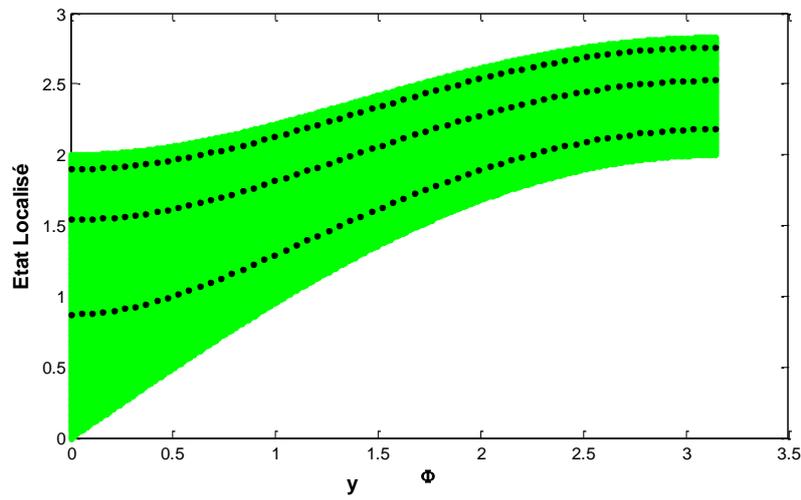


Figure III. 12. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

III.2.4.4. Densité d'état

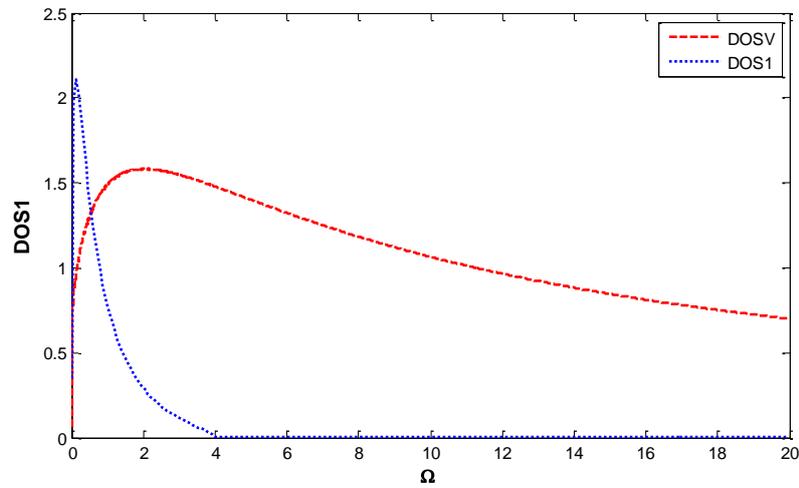


Figure III. 13. Densité d'état pour atome 1 en fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

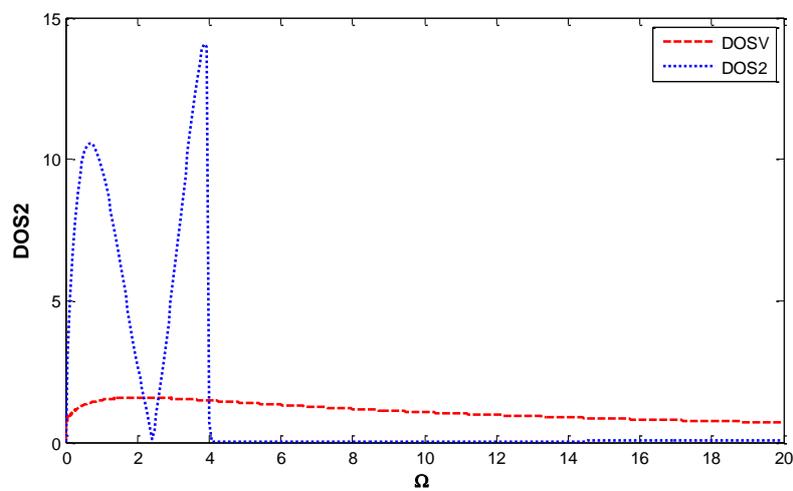


Figure III. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

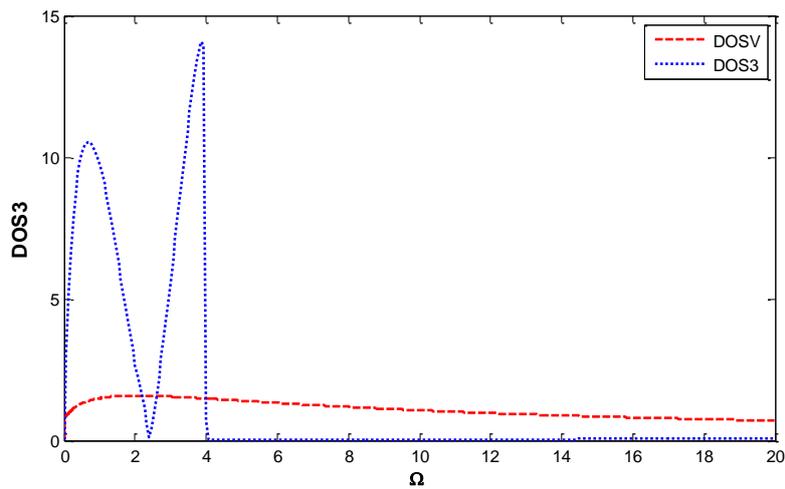


Figure III.15. Densité d'état pour atome 3 en fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

III.2.5. diffusion (Une couche mince deux plans insérées)

III.2.5.1. Coefficients de transmission et de réflexion

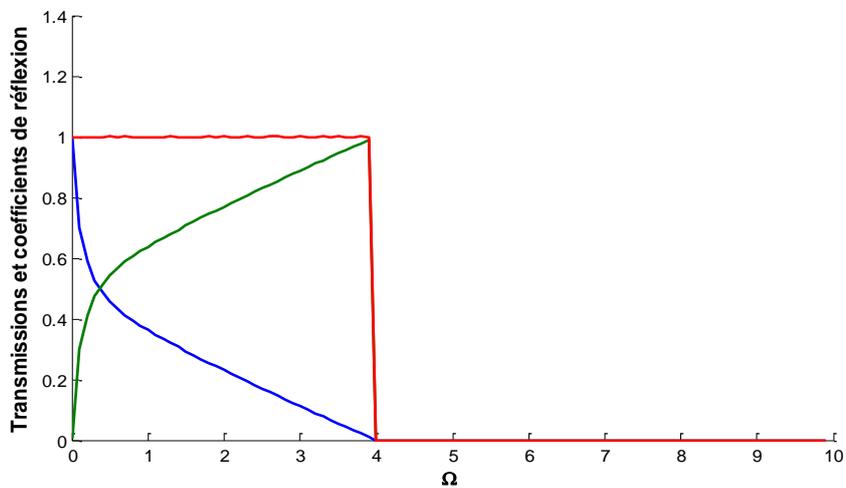


Figure III.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.

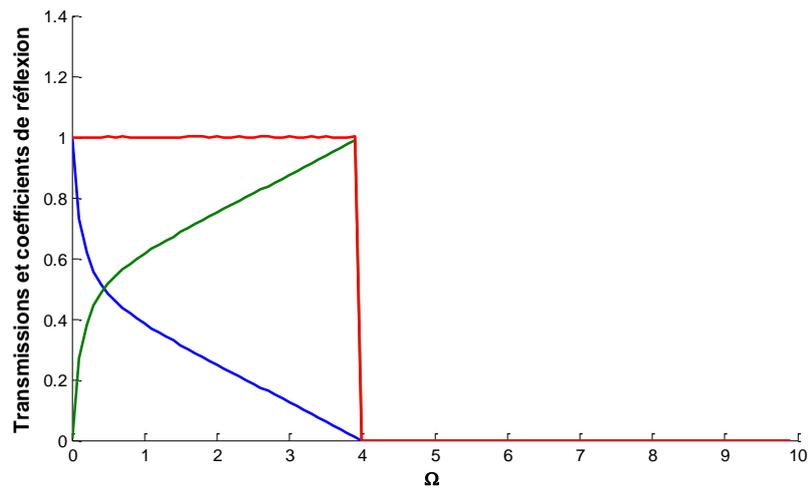


Figure III.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

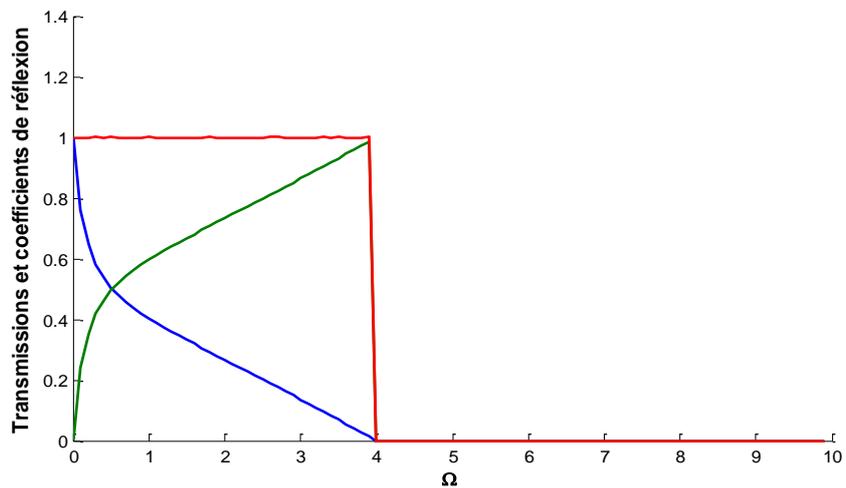


Figure III.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement.

III.2.5.2. Conductance magnonique

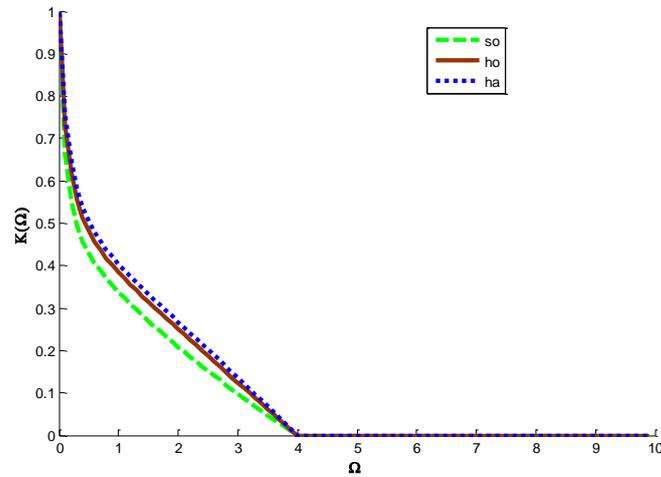


Figure III. 19. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction Ω intégrale d'échange entre les premiers voisins

III.2.5.3. Etats localisés

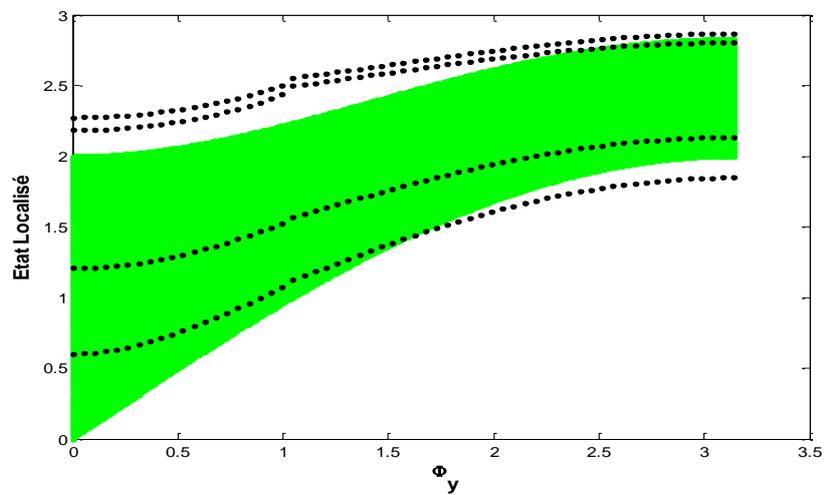


Figure III. 20. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

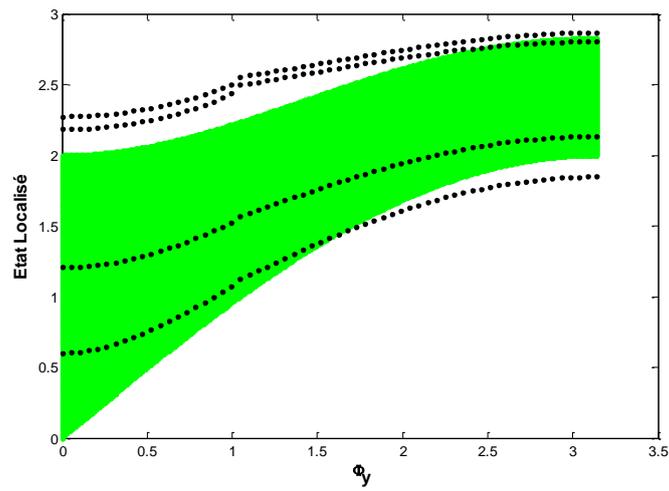


Figure III. 21. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

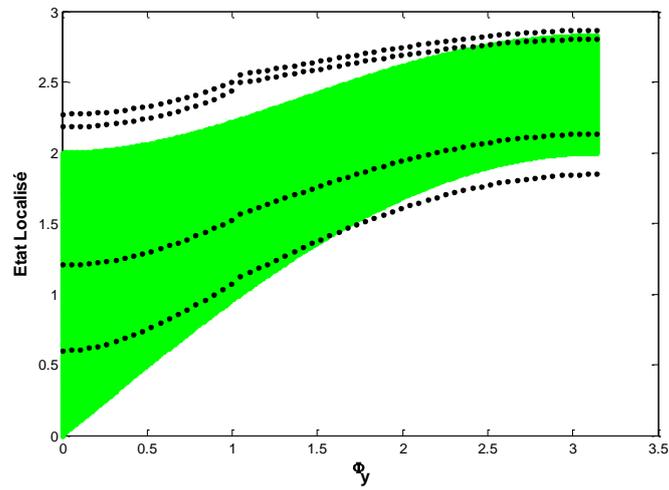


Figure III. 22. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.

III.2.5.4. Densité d'état

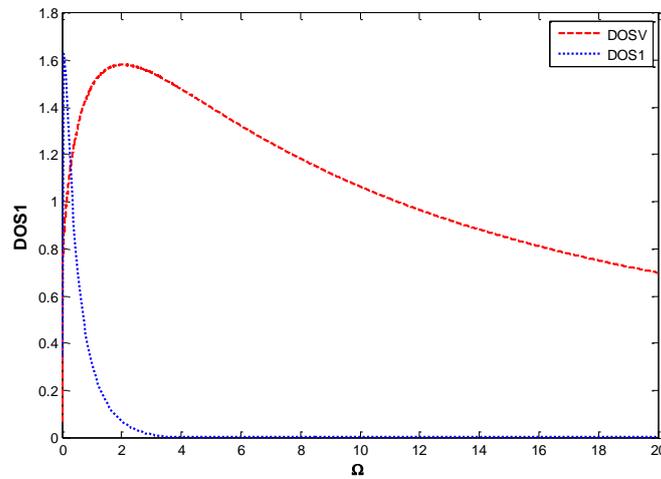


Figure III. 23. Densité d'état pour atome 1 en fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

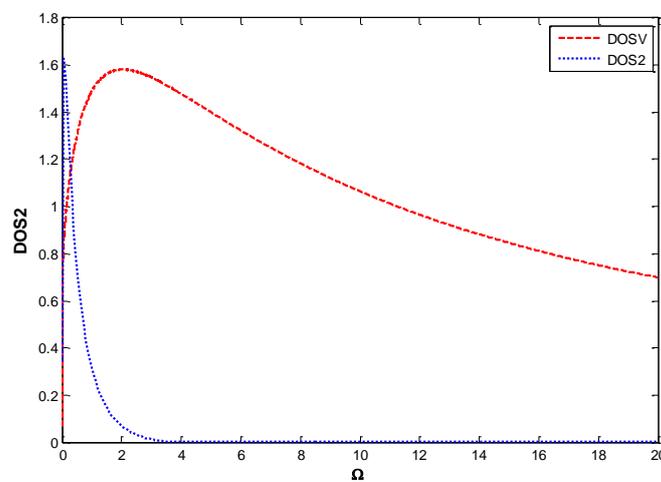


Figure III. 24. Densité d'état pour atome 2 fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

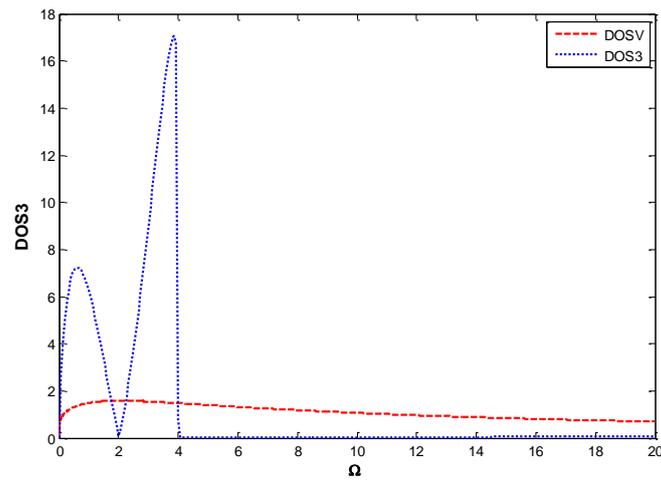


Figure III.25. Densité d'état pour atome 3 fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

III.2.6. diffusion (Une couche mince trois plans insérées)

III.2.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion

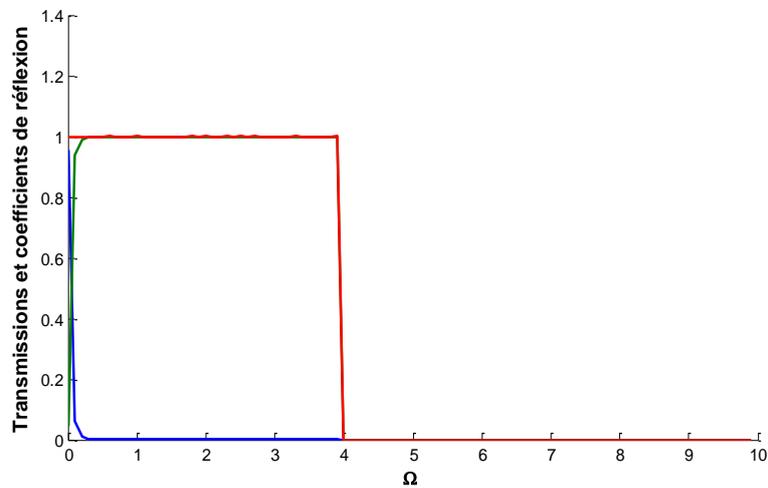


Figure III.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.

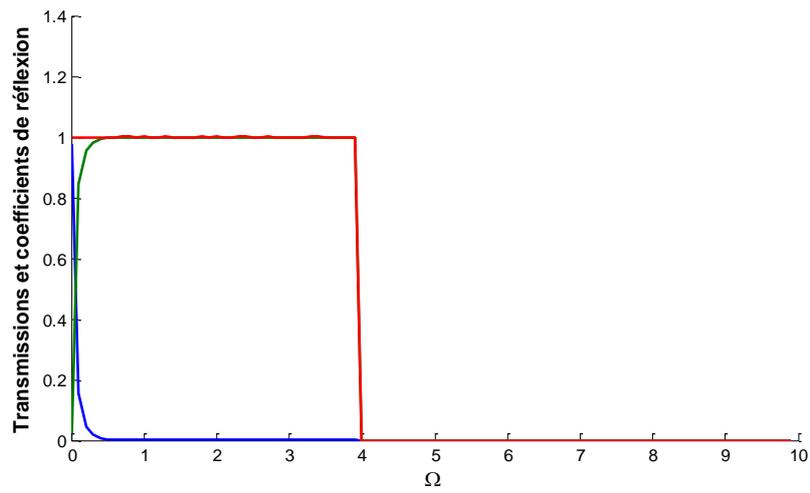


Figure III.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

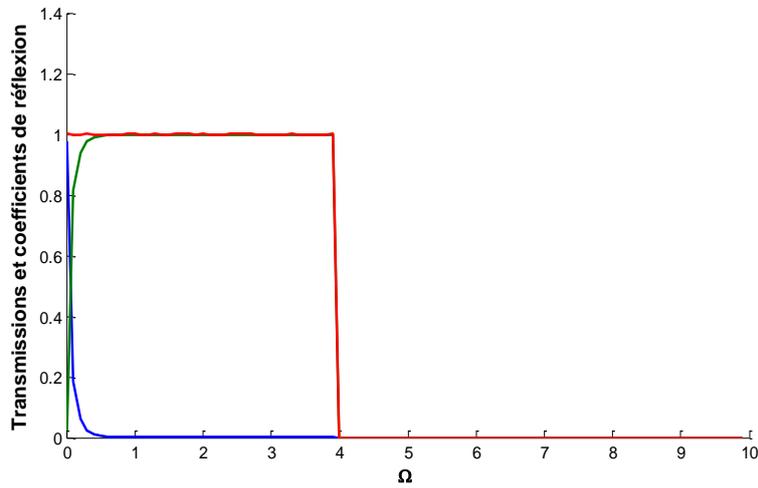


Figure III.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement.

III.2.6.2. Conductance magnonique

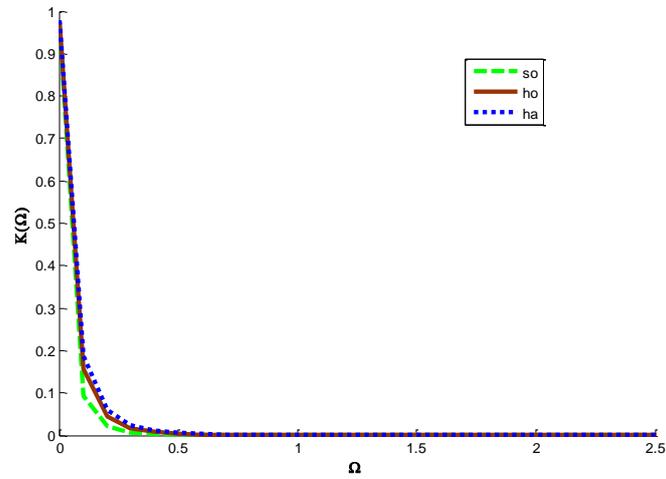


Figure III. 29. Conductance magnonique ou transmittance en tant que fonction Ω intégrale d'échange entre les premiers voisins.

III.2.6.3. Etats localisés

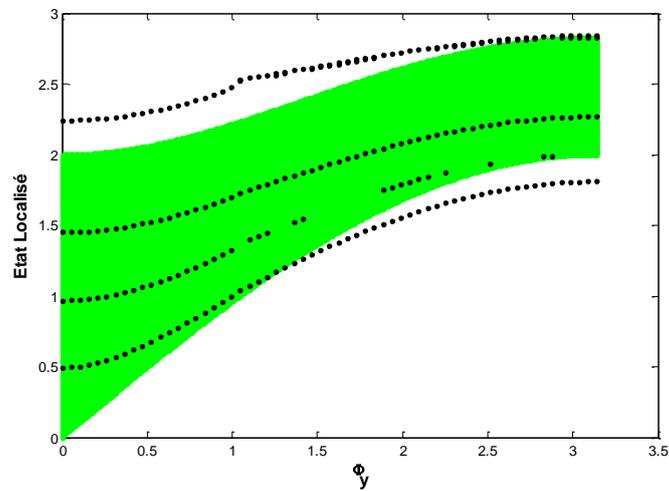


Figure III. 30. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

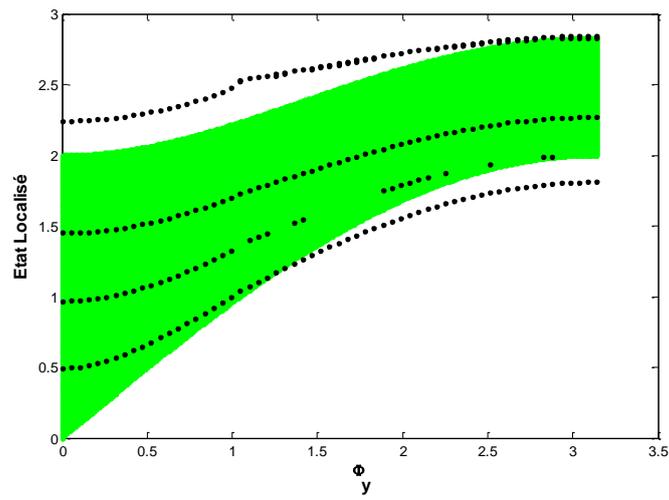


Figure III. 31. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

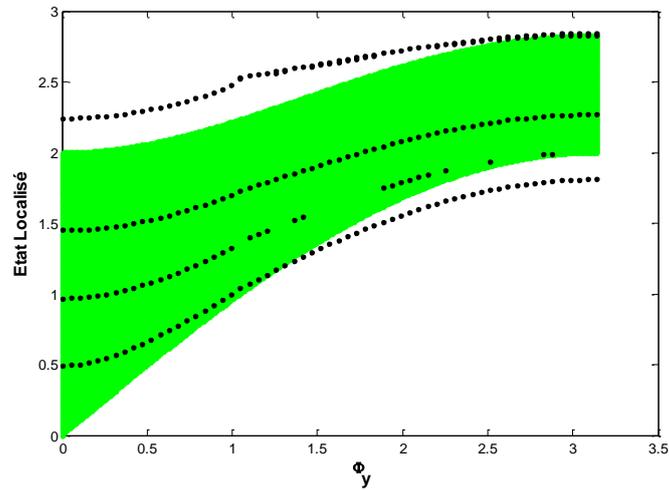


Figure III. 32. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.

III.2.6.4. Densité d'état

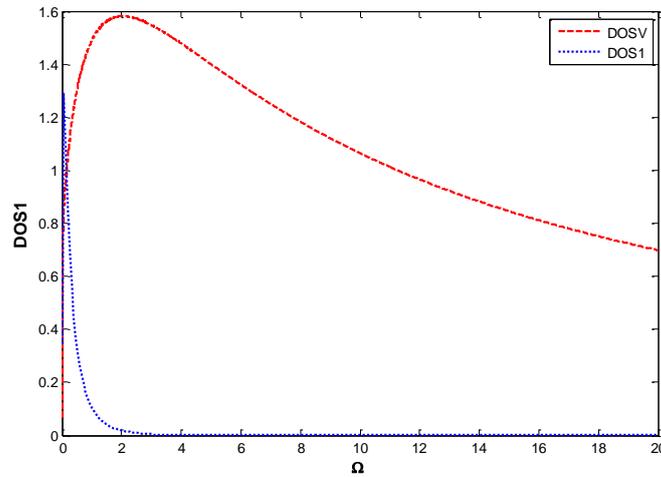


Figure III. 33. Densité d'état pour atome 1 fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

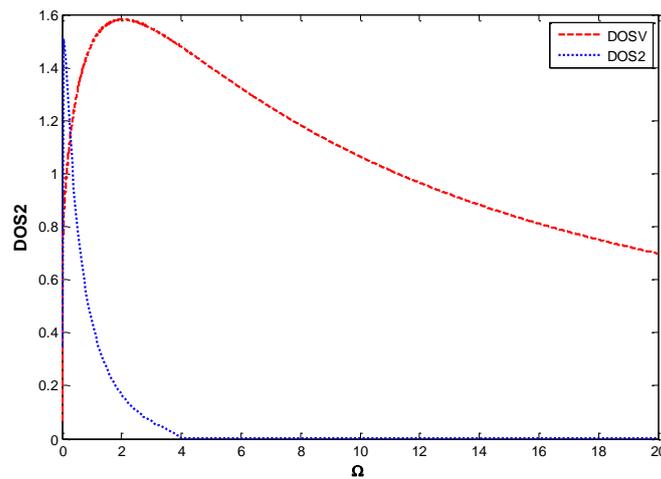


Figure III. 34. Densité d'état pour atome 2 fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

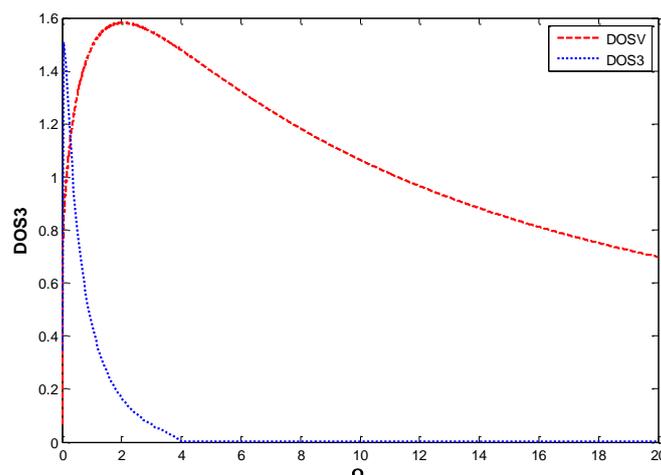


Figure III. 35. Densité d'état pour atome 3 fonction de la fréquence sans dimension Ω et les paramètres de la zone de défaut

III .3 Résultats et discussion

Il convient de noter que, bien que nos résultats numériques ne concernent pas directement aucune expérience, les systèmes expérimentaux les plus pertinents pour l'étude théorique du transport magnétique que nous proposons dans ce travail sont les systèmes sandwichs A/B(n)/A avec $n=1,2$ et 3. On constate que les coefficients de transmission et de réflexion sont attribués à T et R respectivement. La figure 3 (a, b, c) montre les résultats des mises en œuvre numériques de notre modèle de diffusion pour trois scénarios d'échange magnétique distincts dans le domaine du défaut, en fonction de la modification des intégrales d'échange magnétique de HEISENBERG de la zone perturbée par rapport à ceux de volume.

a) $J_A=0.8$, $J_{AB}=1.5$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

b) $J_A=1$, $J_{AB}=0.5$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

c) $J_A=1.1$, $J_{AB}=2.0$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

Dans le premier exemple, dans ce cas, les coefficients T et R sont égaux (ils ont la même valeur) à la fréquence donnée Ω . On observe une transmission totale à la fréquence Ω .

Nous avons dessiné une carte de l'ensemble du champ magnonien entourant le domaine défaut. Cela permet de calculer la conductance, ou transmission, des magnons lorsqu'ils se déplacent d'un point A à un point B sur la zone de contact. D'un point de vue théorique et pratique, ces

spectres pourraient offrir des informations inestimables sur les intégrales d'échange magnétiques de Heisenberg.

III.4. Propriétés magnétique d'une interface A/B

III.4 .1. Formulation du problème

Nous avons choisi la figure (III.36) ci-dessous comme système modèle pour mettre en œuvre

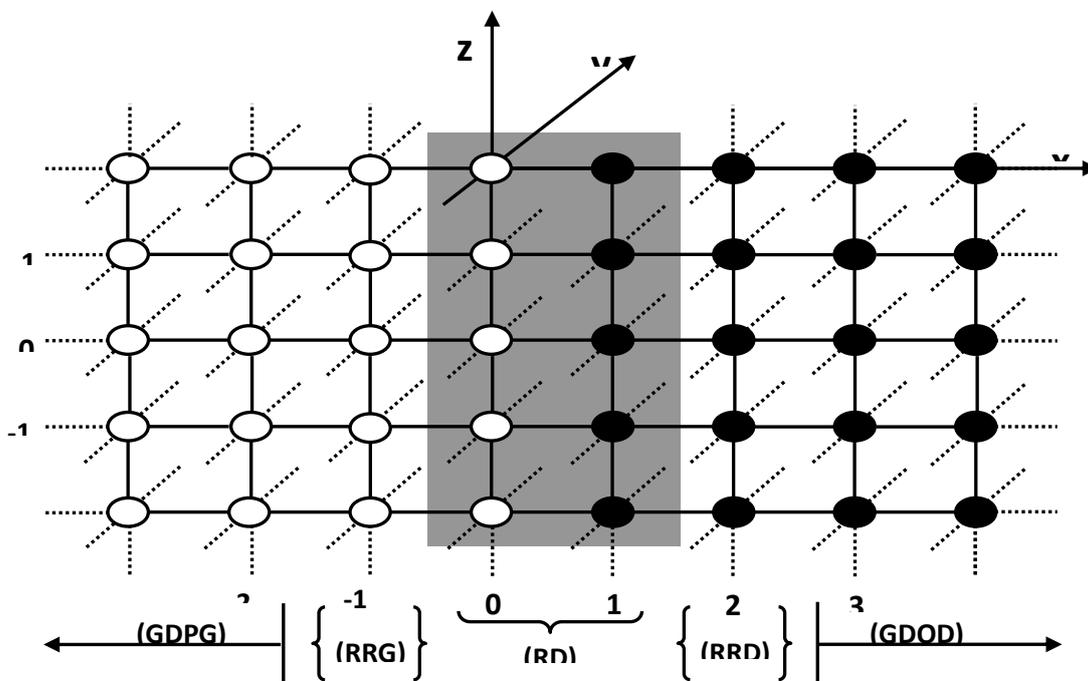


Figure III.36. Représentation schématique de l'interface magnétique couplant

notre modélisation. Il s'agit de la juxtaposition de deux ferromagnétiques Heisenberg semi-infinis différents A et B.

A chaque atome du réseau, nous avons attribué un vecteur de spin $S_p(n, s, m)$, de composantes S_p^x , S_p^y et S_p^z . Les indices (n, s, m) , sont des nombres entiers donnant la position du vecteur spin le long des trois directions cartésiennes x , y et z respectivement. L'axe z et l'axe y sont supposés parallèles à l'interface magnétique. Tandis que l'axe x est supposé normal à cette dernière.

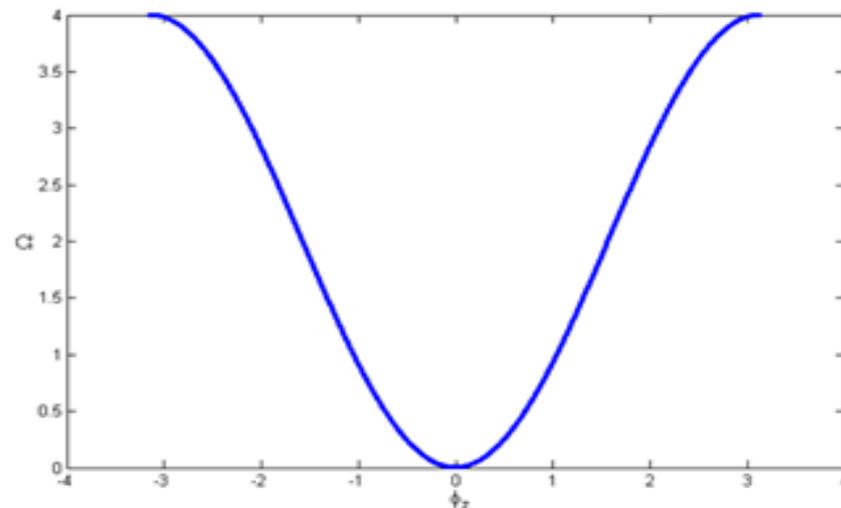


Figure III.37. Courbes de dispersion des magnons d'ordre ferromagnétique de CS pour φ_z courant $[-\pi, +\pi]$ et $\varphi_x=0$, $\varphi_y=0$.

Comme les paramètres physiques des deux systèmes A et B diffèrent, l'interface de contact entre ces deux matériaux présente un défaut qui perturbe la symétrie de translation dans la direction x . Par conséquent, le théorème de Bloch n'est pas applicable dans cette direction. Cela explique la complexité de mener une étude dynamique des rotations du système illimité. Il est donc essentiel de recourir à la méthode de raccordement pour résoudre ce problème.

L'utilisation de la méthode de raccordement nécessite la division du système en trois régions principales, qui sont:

- une région de défaut notée par **(RD)**. Celle-ci contient les vecteurs de spin appartenant au domaine perturbé du système.
- une région dite de volume, qui se trouve suffisamment loin du défaut. Cela dans le but

d'avoir des caractéristiques du système semi-infini. Dans notre cas on a deux régions de volumes; l'une du côté droit du défaut qu'on note par **(GOPD)**, et l'autre du côté gauche qu'on note par **(GOPG)**.

- une troisième région dite de raccordement, celle-ci est située entre la région de défaut

Et la région de volume. Dans le présent cas, on a deux régions de raccords; une du côté droit du défaut, qu'on note par **(RRD)**, et l'autre du côté gauche du défaut, elle est notée par **(RRG)**.

Maintenant, après avoir fait une description générale du système que nous avons choisi pour faire notre modélisation de la diffusion d'ondes de spin, la question importante qu'on pourra poser est la suivante:

" La propagation des modes propres du guide d'onde parfait est-elle affectée par une telle configuration de défaut ? "

Nous avons également fixé l'origine de l'axe (ox) sur la position $n = 0$, de la première colonne perturbée, et nous avons choisi une fois pour toute de considérer les ondes incidentes provenant de la gauche du défaut, se dirigeant vers la droite. Bien que le mode incident puisse être une superposition des modes propres du guide d'onde parfait, nous nous limitons à une onde incidente monomode pour simplifier les expressions, ce qui permet d'écrire l'amplitude de l'onde incidente pour $n < 0$, à la manière suivante [14-28]:

$$\vec{u}_{inci}^n = [Z(\bar{\nu})]^n \cdot \vec{p}(\bar{\nu}) \quad (\text{III. 7})$$

L'indice $\bar{\nu}$ désignera toujours le mode incident, et $Z(\bar{\nu})$ les facteurs de phase associés au mode propre $\bar{\nu}$ et $\vec{p}(\bar{\nu})$ le vecteur propre correspondant. L'indice n désigne le site occupé par un vecteur de spin suivant la direction de propagation (oxo).

III.4.1.1. Matrice dynamique du système perturbé

La matrice dynamique du système perturbé est générée par les équations du mouvement de précession des vecteurs de spin situés dans la région de défaut et dans la région de raccordement. Les vecteurs de spin de la région du défaut (**RD**) ainsi que ceux des deux régions de raccordement (**RRD**) et des deux régions de raccordement (**RRG**) sont sélectionnés afin d'obtenir un environnement des deux guides d'ondes parfaits (**GOPD**) et **GOPG**. On peut représenter la matrice rectangulaire utilisée pour rédiger les équations du mouvement de précession de ces vecteurs de spin de la manière:

$$[M_d] \cdot |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{III. 8})$$

Où $|u\rangle$ est n vecteur qui représente les amplitudes de précession de tous les vecteurs de spin d'une zone comprise entre les colonnes $n = -1$ et $n = 2$.

III.4.1.2. Matrice de raccordement

Dans cette section de notre modélisation, l'objectif est d'établir les relations de connexion entre les amplitudes de précession des vecteurs de spin appartenant au domaine perturbé, certains sites de la région de connexion et les champs de précession des modes propres des deux guides d'ondes parfaits.

Lorsqu'elle atteint la zone de défaut, une onde incidente qui vient de la gauche vers la droite se divise en deux parties : une transmission que l'on enregistre par \vec{u}_t , et une autre réfléchie qu'on note par \vec{u}_r , (*Figure III.38*).

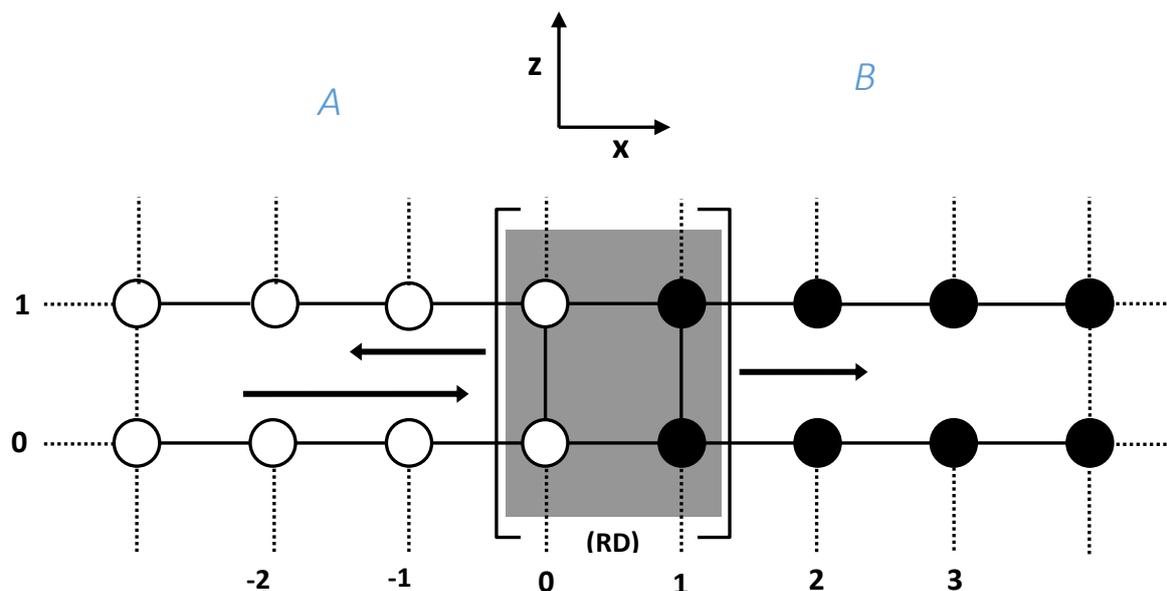


Figure III.38. Représentation d'une onde de spin diffusée par une interface magnétique. Visualisation des ondes résultantes: onde réfléchie (OR) et onde transmise (OT).

Le développement des deux ondes, réfléchie et transmise, se fait à partir d'une combinaison linéaire de vecteurs $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$, définissant deux espaces finis, sur la base des modes propres. Notons que les dimensions des vecteurs unitaires $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$ sont liés au nombre de modes propageant obtenus lors de l'étude des deux guides d'ondes parfaits, et on écrit : [38-67] Les quantités $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$ sont des facteurs complexes, qui à une normalisation par le rapport des vitesses de groupe près, permettent l'obtention de certaines grandeurs physiques intéressantes.

La méthode de connexion peut être utilisée pour exprimer la composante cartésienne α du champ de précession d'un vecteur de spin situé en dehors de la région de défaut (RD). [36-38] [38-65] Les amplitudes de précession dans les deux directions cartésiennes d'un vecteur de spin appartenant au (GOPG) peuvent être exprimées comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de précession du guide d'onde parfait gauche et la partie réfléchie à la même fréquence.:

$$u'_\alpha(n, m) = [Z(\bar{v})]^{-n} u(\bar{v}) + \sum_v [Z(v)]^{-n} R_{v\bar{v}} u(\bar{v}) \quad \text{où } n < 0 \quad (\text{III.9})$$

De La même manière, pour un site atomique du **(GOPD)**, les amplitudes de précessions des vecteurs de spin peuvent s'exprimées ainsi :

$$u_{\alpha}(n, m) = \sum_{\nu} \cdot [Z(\nu)]^n T_{\nu\bar{\nu}} u(\nu) \quad \text{où } n > 0 \quad (\text{III. 10})$$

$Z(\nu)$ facteur de phase obtenu par l'étude magnétique en volume et $u(\nu)$ vecteur propre de la matrice de volume. ν le nombre de mode obtenu en volume. Le vecteur $|u\rangle$ décrivant les amplitudes de précession des vecteurs de spin de la zone grisée sur la figure (III.1) et des colonnes $n = -1$ et $n = 2$, peut se décomposer en deux parties : la première est notée par $|irr\rangle$, elle est constituée par les amplitudes de précession des vecteurs de spin des sites irréductibles formant la région du défaut, quand à la seconde, notée par $|rac\rangle$, elle est formée par les amplitudes de précession des vecteurs de spin des sites appartenant aux deux colonnes $n = -2$ et $n = 3$, ceci pour les deux bases $T_{\nu\bar{\nu}}$ et $R_{\nu\bar{\nu}}$. Ainsi on écrit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III. 11})$$

On peut décrire le raccordement des spins en utilisant les équations (III, 5) et (III, 6) en utilisant l'expression suivante:

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R_{\nu\bar{\nu}}\rangle \\ |T_{\nu\bar{\nu}}\rangle \end{bmatrix} + |IH\rangle \quad (\text{III. 12})$$

où I_d est une matrice identité, R_1 , R_2 , R_3 et R_4 sont des matrices carrées, et $|IH\rangle$ est un vecteur regroupant les termes inhomogènes, décrivant l'onde incidente. Le système d'équation précédent, peut donc s'exprimé à l'aide de la matrice de raccordement $[M_R]$ comme suit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R_{\nu\bar{\nu}}\rangle \\ |T_{\nu\bar{\nu}}\rangle \end{bmatrix} + |IH\rangle \quad (\text{III. 13})$$

$$[M_R] = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix}$$

où :

.

III.4.1.3. Calcul des grandeurs physiques

Comme nous l'avons signalé auparavant, les quantités $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$ ajoutées aux équations précédentes, offrent la possibilité d'obtenir toutes les grandeurs physiques captivantes. Les coefficients de réflexion et de transmission, ainsi que la conductance magnonique, font partie de ces mesures.

III.4.2. Calcul des coefficients de réflexion et de transmission

A partir des quantités $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$ on peut calculer les probabilités de réflexion et de transmission. Soit $|R_{v\bar{v}}\rangle$ et $|T_{v\bar{v}}\rangle$, les vecteur de base pour les coefficients de réflexion et de transmission, et $|irr\rangle$, le vecteur obtenu en fonction des amplitudes de précession des vecteurs de spin des sites irréductibles de la zone problématique. La réécriture des équations du mouvement de précession des vecteurs de spin des atomes qui composent le système perturbé est possible dans la base de données $[|irr\rangle, |R_{v\bar{v}}\rangle, |T_{v\bar{v}}\rangle]$. En employant les équations (III, 5), (III, 6) et (III, 8), il est possible d'écrire les équations du mouvement de précession des vecteurs de spin qui forment le défaut, ce qui donne lieu à un système d'équations inhomogènes de la forme suivante :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R_{v\bar{v}}\rangle \\ |T_{v\bar{v}}\rangle \end{bmatrix} + |IH\rangle \quad (III.14)$$

En multipliant l'équation (III, 10) par la matrice dynamique $[M_d]$ du système perturbé, on obtient alors un système d'équation qui a la forme suivante:

$$[M_d] \cdot |u\rangle = [M_d] \cdot \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_d] \cdot [M_R] \cdot \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_{v\bar{v}}\rangle \\ |T_{v\bar{v}}\rangle \end{pmatrix} + [M_d] \cdot |IH\rangle \quad (\text{III. 15})$$

Cela peut être résumé comme suit :

$$[M_d] \cdot [M_R] \cdot \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_{v\bar{v}}\rangle \\ |T_{v\bar{v}}\rangle \end{pmatrix} = [M_S] \cdot \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_{v\bar{v}}\rangle \\ |T_{v\bar{v}}\rangle \end{pmatrix} = -[M_d] \cdot |IH\rangle \quad (\text{III. 16})$$

où encore à :

$$\begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_{v\bar{v}}\rangle \\ |T_{v\bar{v}}\rangle \end{pmatrix} = -[M_S]^{-1} \cdot [M_d] \cdot |IH\rangle \quad (\text{III. 17})$$

Les amplitudes de précession des vecteurs de spin sont prises en compte dans la résolution du système d'équations (III, 11) $|irr\rangle$ de la région du défaut ainsi que des grandeurs $R_{v\bar{v}}$ et $T_{v\bar{v}}$, pour une énergie incidente Ω .

Les quantités $R_{\nu\bar{\nu}}$ et $T_{\nu\bar{\nu}}$, nous permet de calculer les coefficients de réflexions et de transmissions $r_{\nu\bar{\nu}}$ et $t_{\nu\bar{\nu}}$, en prenant soin de les normalisés par le rapport des vitesses de groupe, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité de la somme des parties réfléchis et transmises.³⁸

Plus précisément pour notre cas où les ondes provenant du côté gauche du défaut selon le mode propre $\bar{\nu}$, le coefficient de réflexion est donné par la relation suivante :

$$r_{\nu\bar{\nu}} = \left(\frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} \right) \cdot |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (\text{III. 18})$$

et la transmission du coefficient par la relation :

$$t_{\nu\bar{\nu}} = \left(\frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} \right) \cdot |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (\text{III. 19})$$

où V_g désigne la vitesse de groupe correspondante au mode propre ν .

La normalisation par des vitesses de groupe et pour les coefficients de transmission et de réflexion définis ci-dessus est imposée par la relation unitarié.t, comme dans tout processus de diffusion.

$$\sum_{\nu} r_{\nu\bar{\nu}} + t_{\nu\bar{\nu}} = 1 \quad (\text{III. 20})$$

Dans les chapitres qui viennent, cette dernière relation sera très utile comme test pour contrôler nos programmes de calcul numérique.

III.4.3. Calcul de la conductance magnonique

La définition de la conductance magnonique d'un défaut pour une énergie donnée Ω est extrêmement précieuse, en se basant sur la conductance électrique et phononique associées aux phénomènes de diffusion [38]. Cela permet de décrire la transmission globale des ondes de spin à travers l'interface magnétique reliant les deux semi-infinis ferromagnétiques A et B. Lorsqu'on cherche à décrire la transmission globale des ondes de spin à travers l'interface magnétique entre les deux semi-infinis ferromagnétiques A et B, il est essentiel de définir la conductance magnonique d'un défaut en utilisant une analogie avec la conductance électrique et phononique liées aux phénomènes de diffusion[38]. Cette conduite enregistrée $\sigma(\Omega)$ est calculée en étudiant la somme des coefficients de transmission dans les modes propageants du système sans perturbations:

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (\text{III. 23})$$

Où tous les modes propageants résultant de l'étude magnétique en volume sont sommatoires.

La conductance magnonique σ est un entier qui donne simplement le nombre de modes propageants à l'énergie considérée pour un guide d'onde parfait, sans défaut (non perturbé). Cependant, σ n'est plus entier en présence d'un défaut, et l'écart entre la valeur de σ idéal et sa valeur des processus de diffusion donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion de l'onde de spin sur les défauts.

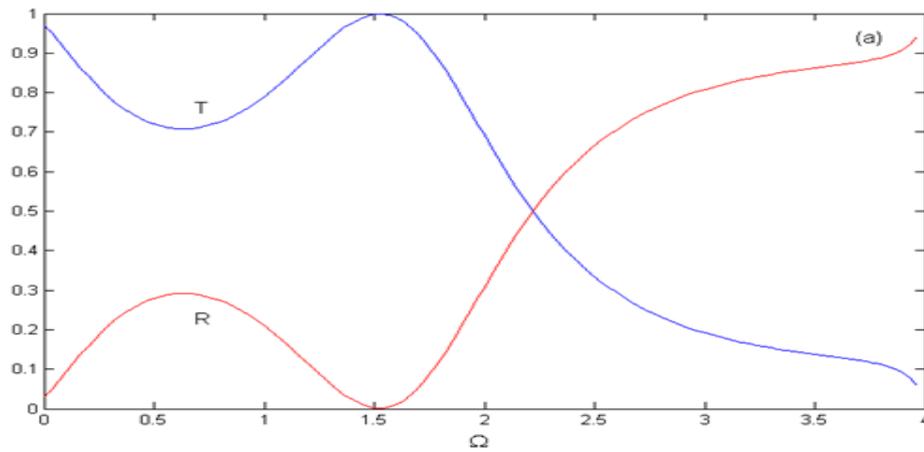


Figure III.39. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange a) $J_A=1$, $J_{AB}=1,5$, $J_B=2$ et $S_A=S_B$.

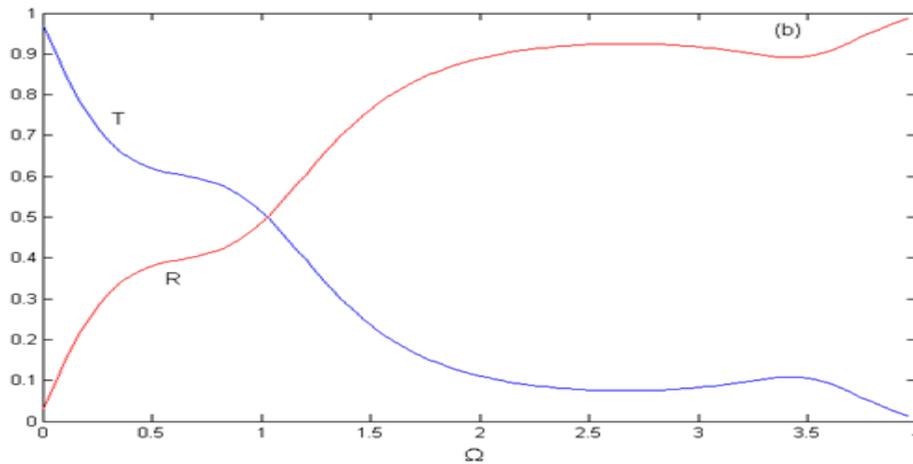


Figure III.40. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange b) $J_A=1$, $J_{AB}=0,5$, $J_B=2$ et $S_A=S_B$.

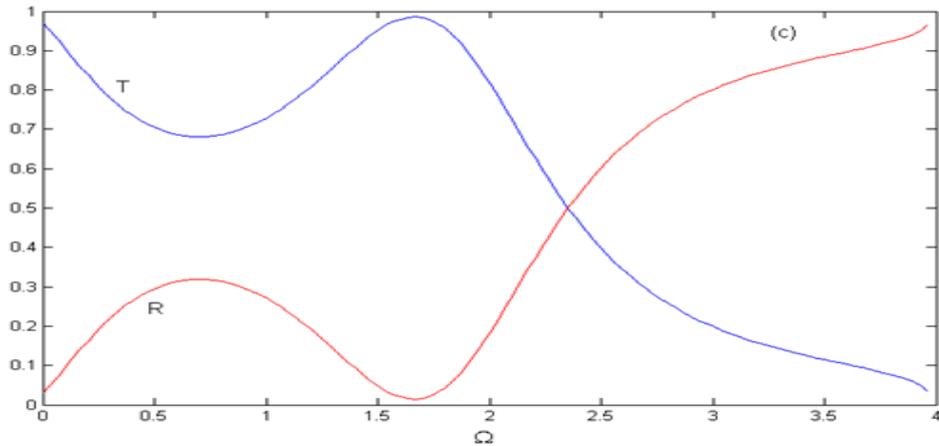


Figure III.41. Les coefficients de réflexion et de transmission du magnon pour les intégrales d'échange c) $J_A=1$, $J_{AB}=2.0$, $J_B=2$ et $S_A=S_B$.

III. 5. Résultats et discussions

Les résultats pour les magnons incidents du réseau semi-infini A (avant le domaine d'interface) au réseau semi-infini B (domaine post-interface) sont rapportés dans l'article.

Notez que bien que nos résultats numériques ne concernent directement aucune expérience, les jonctions à rupture magnétique et les contacts ponctuels magnétiques sont actuellement les systèmes expérimentaux les plus pertinents pour l'étude théorique du transport des magnons que nous proposons dans ce travail. On observe que les coefficients de transmission et de réflexion appartiennent respectivement à T et R. La figure 3 (a, b et c) montre les résultats des implémentations numériques de notre modèle de diffusion pour trois scénarios distincts d'intégrales d'échange magnétique dans le domaine de l'interface, en fonction de la modification de ces paramètres au niveau de l'interface en fonction de la fréquence de diffusion Ω .

a) $J_A=1$, $J_{AB}=1.5$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

b) $J_A=1$, $J_{AB}=0.5$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

c) $J_A=1$, $J_{AB}=2.0$, $J_B=2$ and $S_A=S_B$.

Dans le premier exemple (*Figure III.39*), la valeur d'échange magnétique est choisie pour ceux situés entre les valeurs des deux systèmes semi-infinis (A et B). Dans ce cas, les coefficients T et R sont égaux (ils ont la même valeur) à la fréquence $\Omega=2,27$. On observe une transmission totale à la fréquence $\Omega=1,5$.

Pour le deuxième cas (*Figure III.40*), il n'y a qu'un seul point d'intersection entre les deux coefficients (T et R), à la fréquence $\Omega=1,05$.

Pour le troisième cas (*Figure III.41*), les coefficients T et R sont égaux à la fréquence $\Omega = 2,35$. Dans ce cas le coefficient de transmission (T) passe par son maximum à $\Omega=1,65$.

Dans les trois cas considérés, le coefficient de transmission T, aux basses fréquences, a la même valeur qui vaut 0,96.

Une caractéristique universelle du domaine d'interface est la migration de l'intersection de transmission vers des fréquences plus élevées avec une dureté d'échange magnétique (J_{AB}) améliorée.

Enfin, la diffusion magnonique est représentée pour un système modèle de base d'une interface de spins entre deux ferromagnétiques de sous-réseau de Heisenberg. Nous créons méticuleusement une carte complète du champ magnonique entourant le domaine d'interface. Cela permet de calculer la conductance, ou transmission, des magnons lorsqu'ils se déplacent du point A au point B à travers la zone de contact (jonction). D'un point de vue théorique et pratique, ces spectres pourraient fournir des informations précieuses sur les paramètres intégraux d'échange entourant le domaine de l'interface.

Références bibliographiques

- [1] J. C. Slonczewski, *Current-driven excitation of magnetic multilayers*, J. Magn. Magn. Mat. 159, L1 (1996)
- [2] L. Berger, *Multilayers as spin-wave emitting diodes*, Phys. Rev. B 54, 9353 (1996), J. Appl. Phys. 81, 4880 (1997)
- [3] F. J. Albert, J. A. Katine, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph, *Appl. Spin-polarized current switching of a Co thin film nanomagnet*, Phys. Lett. 77, 3809 (2000)
- [4] J. Grollier et al, *Appl. Spin-polarized current induced switching in Co/Cu/Co pillars*, Phys. Lett. 78, 3663 (2001)
- [5] M. D. Stiles et A. Zangwill, *Noncollinear spin transfer in Co/Cu/Co multilayers*, preprint cond-mat/0110275 (2001)
- [6] M. D. Stiles et A. Zangwill, *Anatomy of spin-transfer torque*, preprint cond-mat/0202397 (2002)
- [7] S. Zhang, P. M. Levy et A. Fert, *Mechanisms of Spin-Polarized Current-Driven Magnetization Switching*, preprint cond-mat/0202363 (2002)
- [8] H. Akinaga et al., *Appl, Magneto-optical properties and the potential application of GaAs with magnetic MnAs nanoclusters*, Phys. Lett. 76, 97 (2000)
- [9] J. Szeftel and A. Khater, *Calculation of surface phonons and resonances: the matching procedure revisited: I*, J. Phys. C: Solid State Phys., 20, 4725(1987).
- [10] A. Khater and M. Abou Ghantous, *Calculation of spin modes on magnetic surface clusters*, Surface Sci. Lett. 498, L97 (2002)
- [11] M. Abou Ghantous and A. Khater, *Magnons localised on surface steps: a theoretical model*, Eur. Phys. J. B 12, 335 (1999)
- [12] M. Abou Ghantous and A. Khater, *Magnons localised on surface steps: a theoretical model*, Eur. Phys. J. B 12, 335 (1999)
- [13] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil and M. Abou Ghantous, *Magnon coherent conductance via atomic nanocontacts*, J. Phys.: Condens. Matter 19 (2007) 266208.
- [14] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet, and A. Khater, *Scattering of vibrational waves in perturbed quasi-one-dimensional multichannel waveguides*, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).

- [15] R. Landauer, *Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance*, J. Phys : Condens-Matter 1, 8099 (1989).
- [16] Khater,A. Belhadi,M. and Abou Ghantous,M. *Phonons heat transport at an atomic well boundary in ultrathin solid film* Eur. Phys. J. B 80, 363–369 (2011)
- [17] Han ,M. Y. *Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons*. Phys RevLett, vol. 98, page 206805, 2007.
- [18] M. Y. Han. *Electron transport in disordered graphene nanoribbons*. Phys RevLett, vol. 104, page 056801, 2010.
- [19] Hands, I. D., Dunn, J. L. and Bates, C. A. *Visualization of staticJahn-Teller effects in the fullerene anion C- 60*. Phys Rev B, vol. 82, page 155.
- [20] Landauer R: *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*. IBM J Res Dev 1957, 1:223–23)
- [21] Büttiker M.*Four-terminal phase-coherent conductance*. Phys Rev Lett1986, 57:1761–1764.
- [22] Slater, J.C. And Koster, G.F. *Simplified Lcao Method For The Periodic Potential Problem*, Phys. Rev,vol 94,N°6.(1954)1498-1524.
- [23] W.A. Harrison. *Why tight-binding theory?* *Solid State Commun*, vol. 124,pages 443–447,2002
- [24] Harrison ,W. A. *Elementary electronic structure*. World Scientific, Singapore, 2004. [Havu et al. 2006] P. Havu, V. Havu, M.J. Puska, M.H. Hakala, A.S. Foster and R.Nieminen. Finite-element implementation for electron transport in nanostructures. J Chem Phys, vol. 124, page 054707, 2006
- [25] Szczésniak ,D. and Khater ,A. *Electronic conductance via atomic wires: a phase field matching theory approach*. Eur Phys J B, vol. 85, page174, 2012.
- [26] Szczésniak,D. Khater, ak,A. Z. B, Szczesniak, R. and AbouGhantous M. *Quantum conductance of silicon-doped carbon wire nanojunctions*.
- [27] Grimech, H., Khater, A. *Mean surface phonon dispersion curves for low index fcc (Ac/B1 – c)IB(klm) surface alloys*.*Surface sci*, Volume 341, Issue 3, 10 November 1995, Pages 227-24
- [28] R. Landauer, *Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices*, Philos. Mag. 21, 863 (1970)

Chapitre IV

Propriétés électroniques

IV.1. Introduction

La théorie électronique des solides repose sur l'idée que les électrons et les trous sont des porteurs de charges. Leurs mouvements dans le champ périodique du cristal sont très différents de ceux des électrons libres. Un modèle développé pour étudier les propriétés électroniques des structures périodiques ou des cristaux est connu sous le nom de théorie des bandes énergétiques des solides. Par contre il faut développer de nouvelles méthodes analytique et numérique pour traiter les problèmes de localisation de propagation et de diffusion d'ondes (phonons, magnons et électrons) dans cas les milieux avec brisures de symétrie. Aussi les propriétés électronique et de diffusion des systèmes de basse dimension sont calculées en fonction de la fréquence de l'onde excitatrice et des grandeurs physiques caractérisant ces milieux. Notons que notre thème est d'actualité. Il s'agit de comprendre l'effet des défauts structuraux et implanté sur les différentes propriétés des nanosystèmes notamment les propriétés électronique des multicouches avec brisure de symétrie. Cas du graphène ou des systèmes de configuration à nia d'abeille.

IV.2. Description du modèle

IV.2. 1. Propriétés électroniques en volume

Déterminer les propriétés électroniques des systèmes de basse dimension avec des défauts structuraux et implantés notamment les phénomènes de localisation et de diffusion en utilisant le formalisme Landauer Buttiker et la méthode de raccordement ainsi que la méthode des liaisons fortes.

C'est une contribution à la compréhension et à la résolution des propriétés électroniques des multicouches et des systèmes de basse dimension avec brisure de symétrie.

Un moyen très utilisé pour calculer la structure de la bande des cristaux est la méthode des liaisons fortes. Elle s'applique lorsque le recouvrement entre les orbitales voisines est faible et crée les états propres des nano-matériaux en utilisant des combinaisons linéaires d'orbitales. La théorie des champs de match de phase et la méthode des liaisons fortes (PMFT) sont des outils puissants pour résoudre les problèmes de propriétés électronique des systèmes de basse dimension et multicouches en général, y compris les brisures de symétrie pour lesquelles les méthodes conventionnelles ne sont pas applicables.

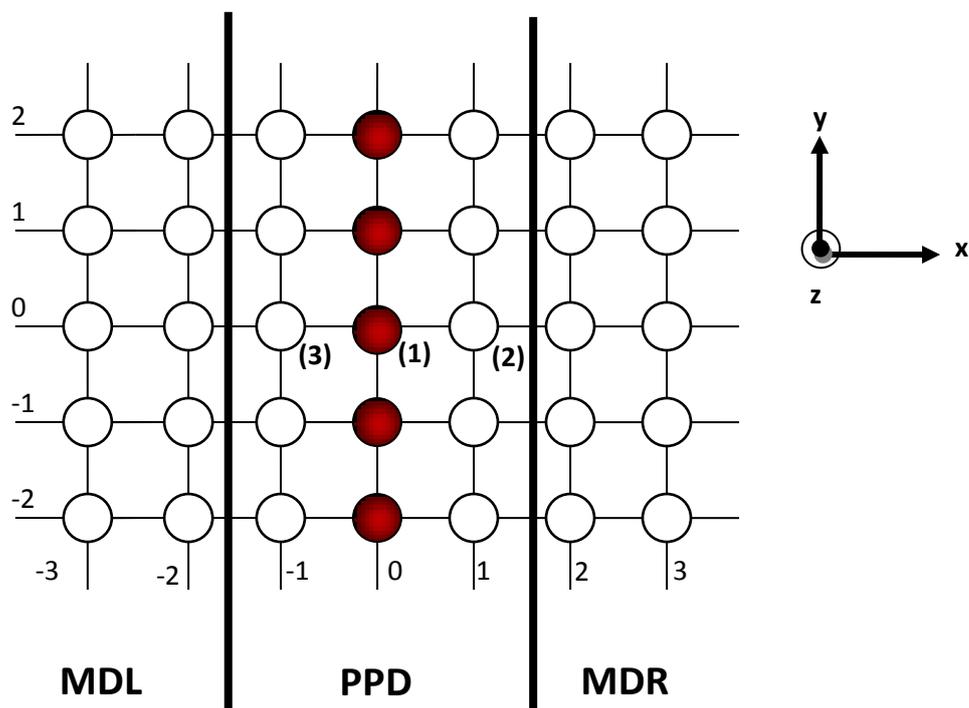


Figure IV.1a. Représentation de la couche mince pour un plan de défauts insérés

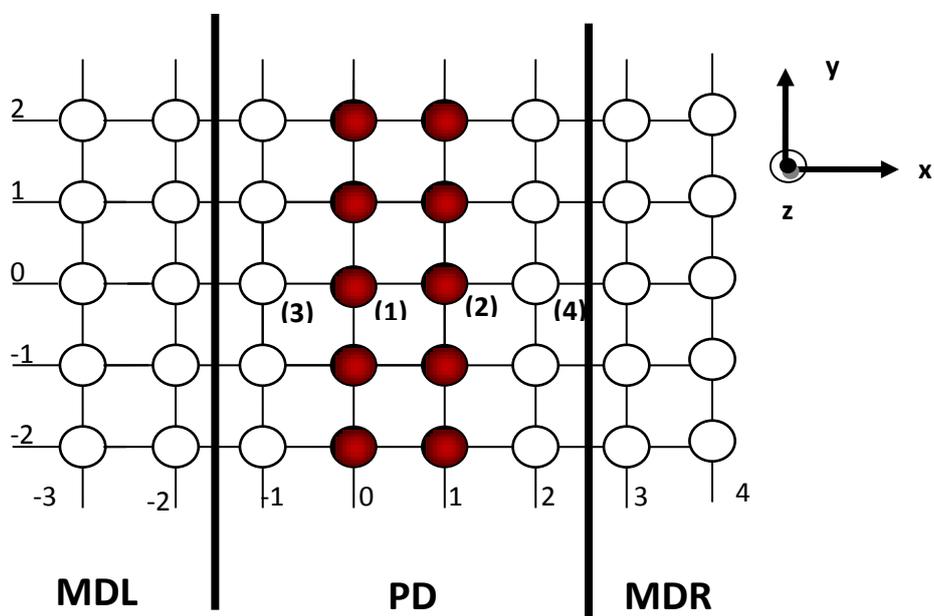


Figure IV.1b. Représentation de la couche mince pour 2 plans de défaut insérés

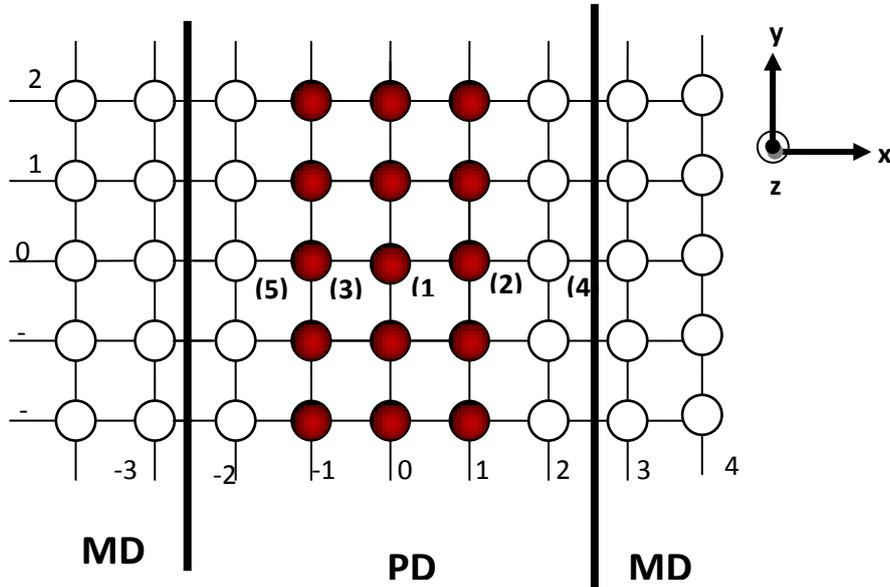


Figure IV.1c. Représentation de la couche mince pour 3 plans de défaut insérés

Les représentations du système modèle que nous avons sélectionné pour analyser le phénomène sont illustrées dans la figure (IV.1) ci-dessous.

Le transport cohérent quantique électronique dans un nanopuits atomique peut être décrit en mécanique quantique par l'équation de Schrödinger comme une seule particule séculaire.

$$H|\psi_k(\vec{r})\rangle = E|\psi_k(\vec{r})\rangle \quad (\text{IV.1})$$

Ψ_k : est l'onde de la fonction d'état du système k.

E : l'énergie de l'état k.

H : Hamiltonien

Où la base des orbitales atomiques qui se chevauchent ou "hybridées" était utilisée comme;

$$|\psi\rangle = \sum_{i,n} C_{i,n} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\phi^n\rangle \quad (\text{IV.2})$$

$C_{i,n}$ désignait les coefficients orbitaux où n était le nombre d'atomes dans la cellule unitaire et i était le nombre d'orbitales ($n = s$). Les fonctions orbitales atomiques sont considérées comme orthogonales;

$$\langle \phi_n^i | \phi_{n'}^i \rangle = \delta_{n,n'} \quad (\text{IV.3})$$

$$\delta_{n,n'} = \begin{cases} 1 & \text{if } n = n' \\ 0 & \text{if } n \neq n' \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

Et le système hamiltonien a été écrit:

$$H = H_0 + V \quad (\text{IV.5})$$

H_0 : l'énergie cinétique des voisins hybrides les plus proches.

V : la matrice d'énergie potentielle.

L'équation de Schrödinger devient :

$$\langle \phi_n^i | (H_0 + V) | \psi \rangle = E \langle \phi_n^i | I | \psi \rangle \quad (\text{IV.6})$$

L'étude de la dynamique électronique près du puits atomique entraîne la création d'une matrice de dynamique rectangulaire, appelée D , induite par le système d'équations séculaires Equation(8), qui renferme davantage de variables inconnues que d'équations. La connaissance des facteurs de phase génériques $[\xi(i), \xi(i)-1]$ de l'Eq. 7, pour les branches $i \in [1, 2]$ caractérisant les valeurs propres et les vecteurs au niveau global, permet cependant une solution à ce problème. Les facteurs de phase déterminent effectivement, dans la méthode d'appariement, les éléments de la procédure de transformation de la matrice dynamique rectangulaire D en une matrice dynamique carrée M_s . Pour cela on considère deux régions différentes dans le cas présent, à gauche et à droite de la limite étendue du puits nanoatomique et deux vecteurs de base différents, $\{R+\}$ et $\{R-\}$ sont définis. Les dimensions vectorielles de $\{R+\}$ et $\{R-\}$ dépendent du nombre de valeurs propres obtenues dans l'étude des propriétés dynamiques des régions globales éloignées du nanopuits atomique. Dans le cas présent, cela correspond à un total de deux états électroniques. Soit $[|U\rangle, |R+\rangle, |R-\rangle]$ le vecteur de base dans un espace de Hilbert construit à cet effet, où le vecteur noyau $|U\rangle$ désigne l'ensemble des sites atomiques irréductibles dans la région du nano-puits plus un minimum ensemble représentatif de sites atomiques dans la région correspondante. Pour une discussion sur la région correspondante, voir Réf. [3-6]. L'ensemble minimum nécessaire de sites atomiques définissant le vecteur $|U\rangle$ est de treize puits atomiques. L'utilisation des équations consécutives pour le puits atomique donne que la matrice rectangulaire de dimension ne peut pas déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres. C'est pourquoi la méthode d'appariement adaptée a été utilisée pour résoudre le problème. De plus, les ondes réfléchies et transmises ont été développées comme une combinaison linéaire de vecteurs pour définir deux espaces finis sur la base de valeurs propres. Les dimensions des vecteurs unitaires étaient liées au nombre de valeurs propres obtenues lors de l'étude de deux guides d'ondes parfaits sur la base de ce qui suit

$$C(n, s, m) = [\xi(\bar{\nu})]^n \cdot p(\alpha, \bar{\nu}) + \sum_{\nu} R_{\nu\bar{\nu}} \cdot [\xi(\nu)]^{-n} \cdot \vec{p}(\alpha, \nu) \quad (\text{IV.7})$$

De la même manière, pour un site atomique de guide d'onde droit parfait (PRW), les coefficients de Harrison peuvent s'exprimer comme suit:

$$C(n, s, m) = \sum_{\nu} T_{\nu\bar{\nu}} \cdot [\xi(\nu)]^n \cdot \vec{p}(\alpha, \nu) \quad (\text{IV.8})$$

Aussi les grandeurs $T_{\nu\bar{\nu}}$ et $R_{\nu\bar{\nu}}$ sont des facteurs de phase complexes de standardisation du rapport de groupe de vitesses qui ont permis l'obtention de certaines grandeurs physiques d'intérêt. Pour les sites situés en dehors de la région de défaut (RD) peuvent être exprimés par la méthode de raccordement [1- 10]. Ceci peut être déplacé par les valeurs propres et le vecteur induits par l'étude électronique au niveau du guide d'onde parfait gauche (PLW) en tant que superposition de l'onde incidente avec les valeurs propres électroniques du guide d'onde parfait gauche à la même fréquence, comme suit les équations 9 et 10. Pour le site situé dans la bonne région du défaut.

La diffusion des ondes électroniques et la dynamique des ondes électroniques ont été examinées via le système de nanostructures à nanopuits. Le produit du défaut Matrice Md et de la Matrice correspondante Mr donne la Matrice carrée Ms dont la matrice opère sur le vecteur $[|U\rangle, |R+\rangle, |R-\rangle]$ sous une forme carrée homogène

$$\text{Det}(\Omega I - M_S(7 \times 5)) = |0|. \quad (\text{IV.9})$$

Ω : dimension moins fréquence

I : Identité matricielle

M_S : Matrice carrée induite par le produit de la matrice de défauts et de la matrice d'appariement.

IV.2.2. Branches de dispersion et facteur de phase

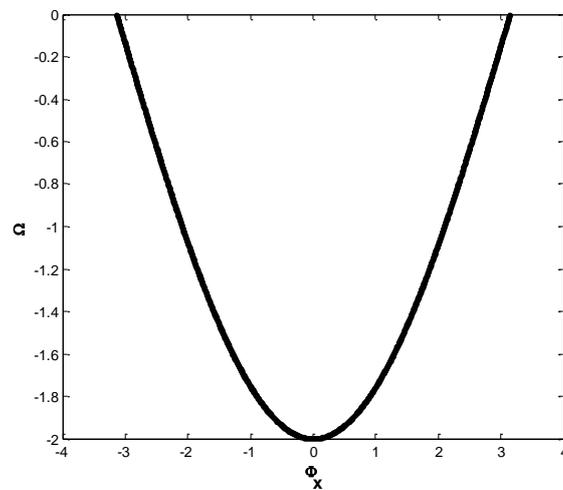


Figure IV.2. Branches de dispersion en fonction du rapport ϕ_x et intégrale de saut Harrison des premiers voisins

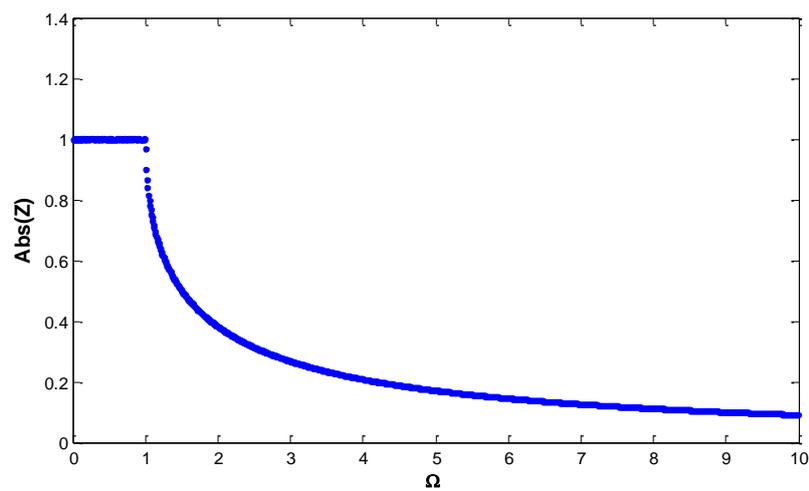


Figure IV.3. Valeur absolue du facteur de phase Z en fonction Ω de r_2 et de la fréquence sans dimension.

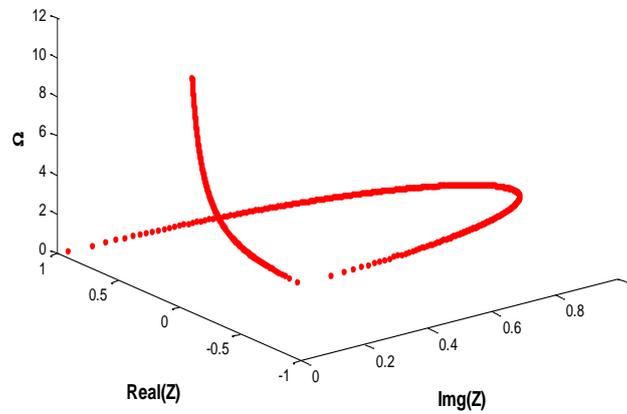


Figure IV.4. Représentation 3D du facteur de phase en fonction r_2 (image Z et réel Z).

IV.2.3. Vitesses de groupe

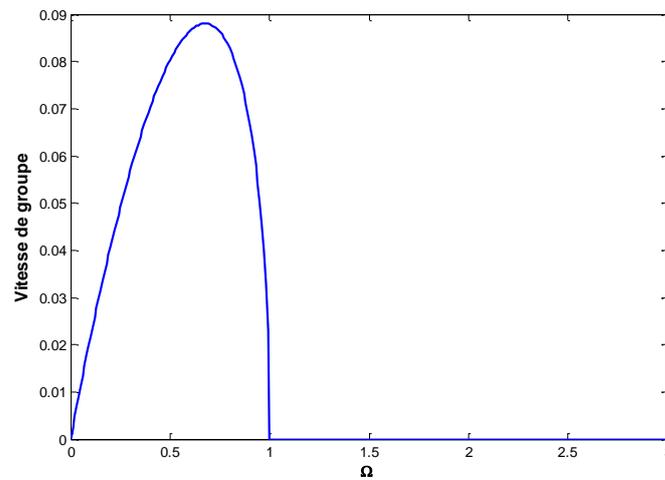


Figure IV.5. Courbes des vitesses de groupe en fonction de l'énergie de diffusion Ω .

IV.2.4. diffusion (une couche mince un plan insérée)

IV.2.4.1. Coefficients de transmission et de réflexion

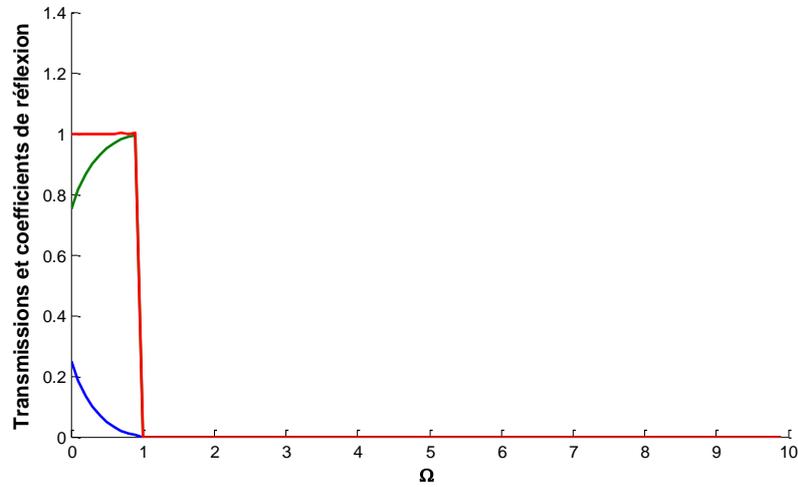


Figure IV.6. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement.

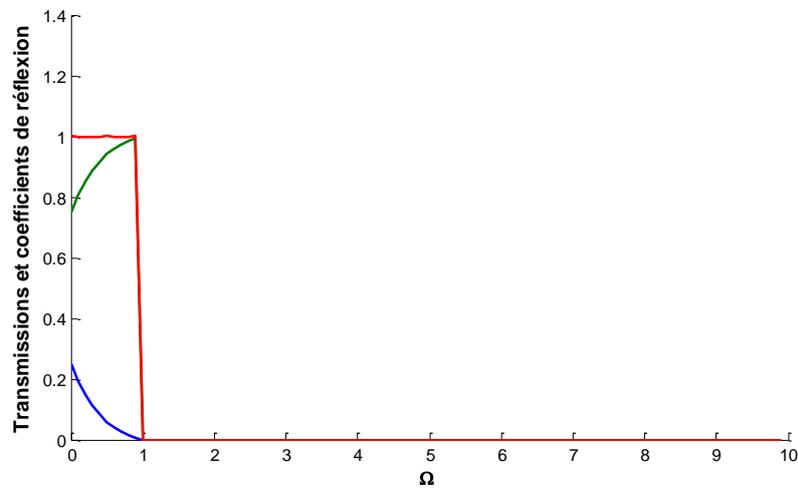


Figure IV.7. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

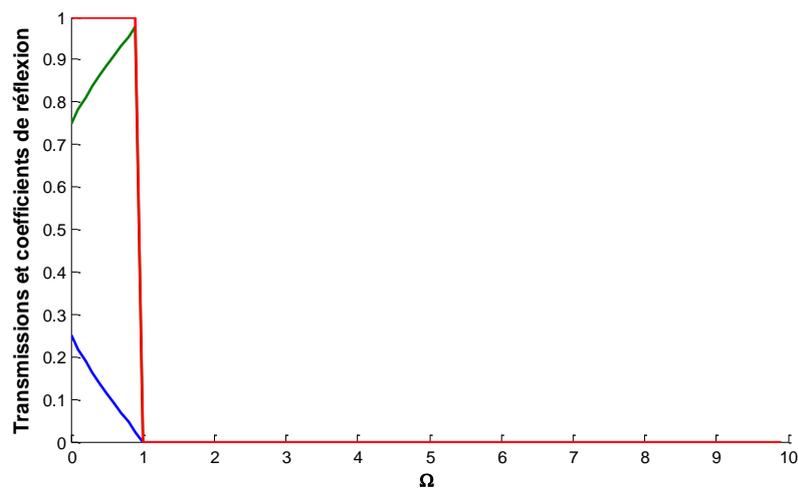


Figure IV.8. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement.

IV.2.4.2. Conductance électronique

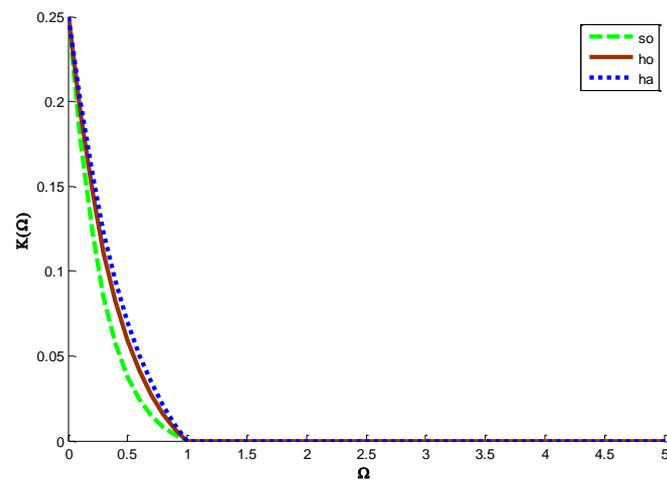


Figure IV. 9. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et des intégrales de saut de Harrison.

IV.2.4.3. Etats localisés

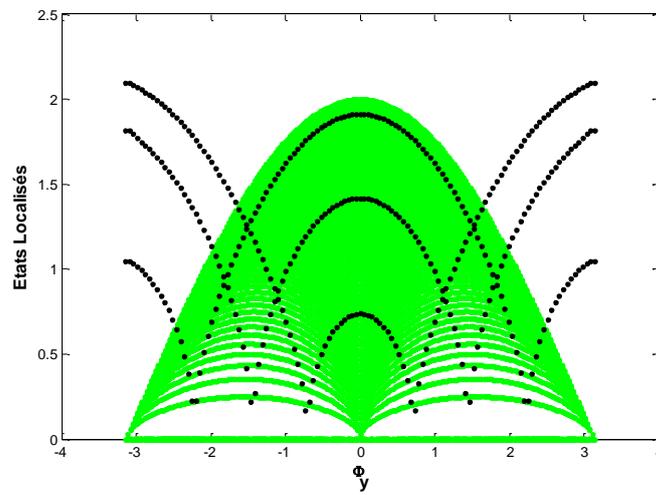


Figure IV. 10. Etats localisés dans le cas du mode de durcissement.

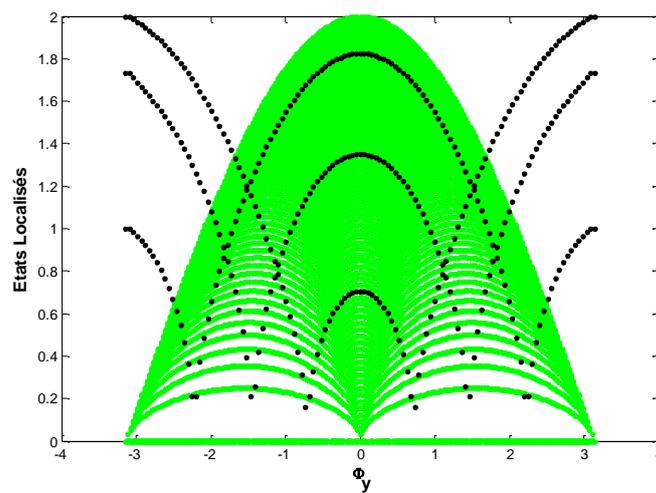


Figure IV. 11. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

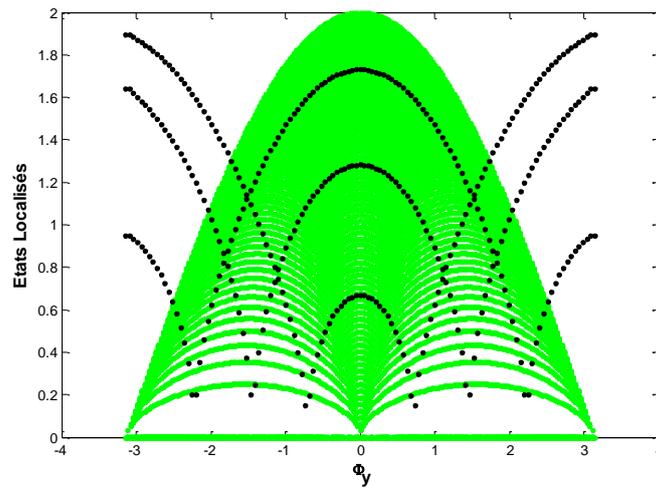


Figure IV. 12. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

IV.2.4.4. Densité d'état

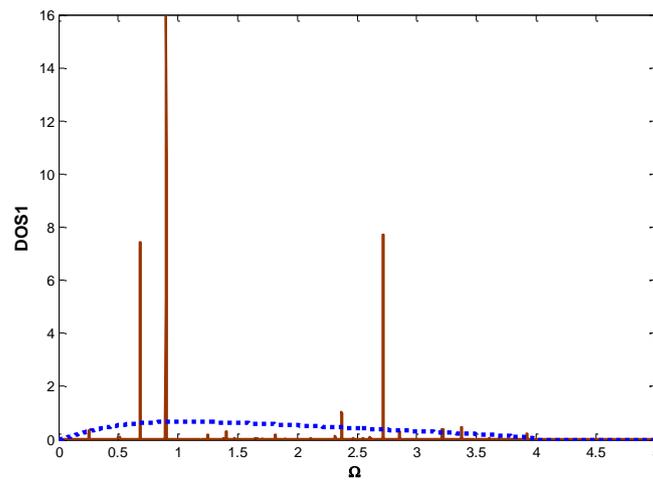


Figure IV. 13. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω .

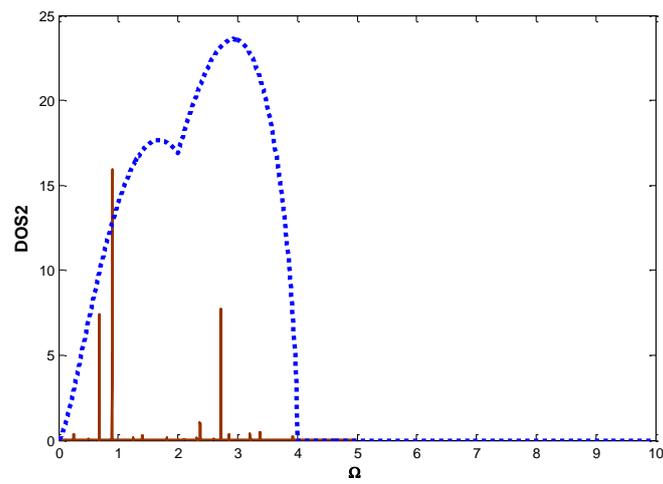


Figure IV. 14. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω .

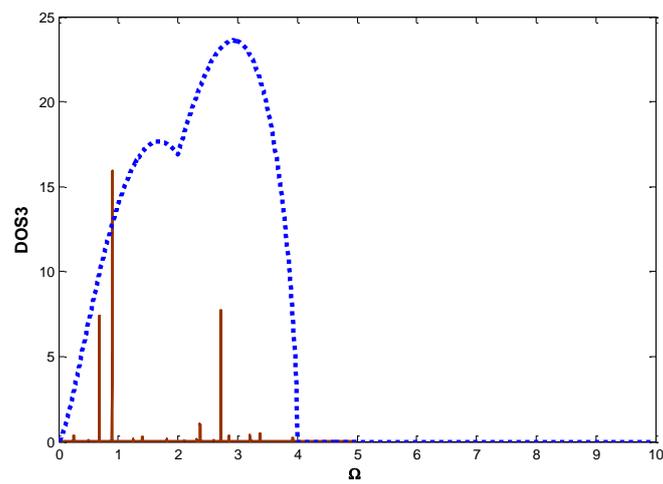


Figure IV. 15. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω .

IV.2.5. diffusion (une couche mince deux plans insérés)

IV.2 .5.1. Coefficients de transmission et de réflexion

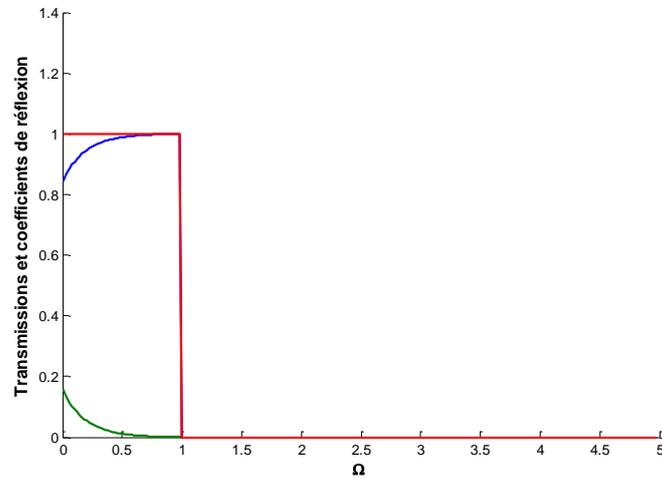


Figure IV.16. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

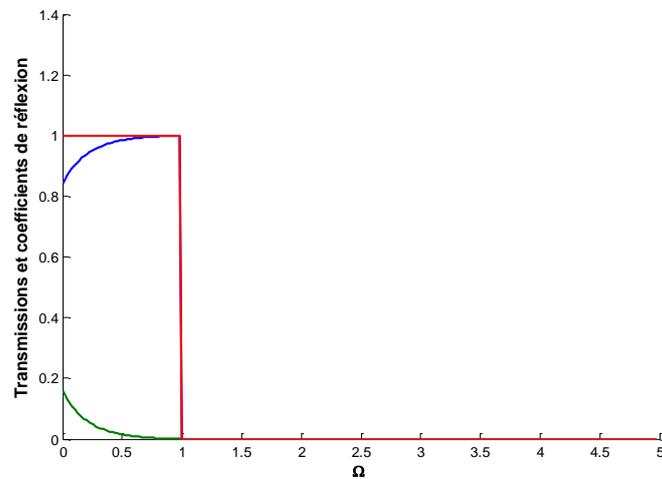


Figure IV.17. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de durcissement

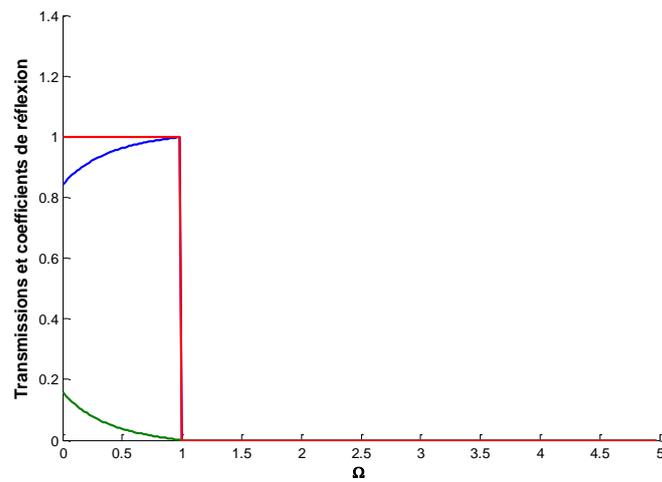


Figure IV.18. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode d'adoucissement

IV.2.5.2. Conductance électronique

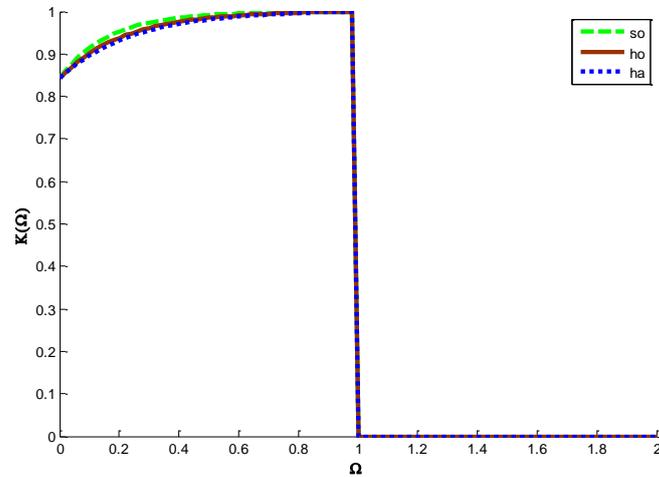


Figure IV.19. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et des intégrales de saut de Harrison.

IV.2.5.3. Etats localisés

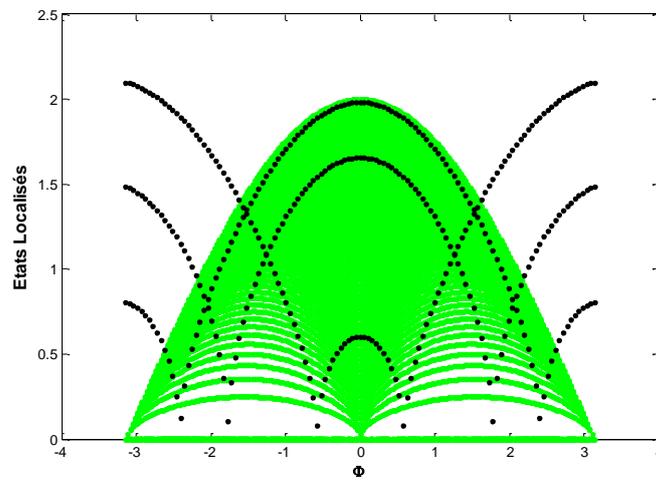


Figure IV. 20. Etats localisés dans le cas du mode de durcissement.

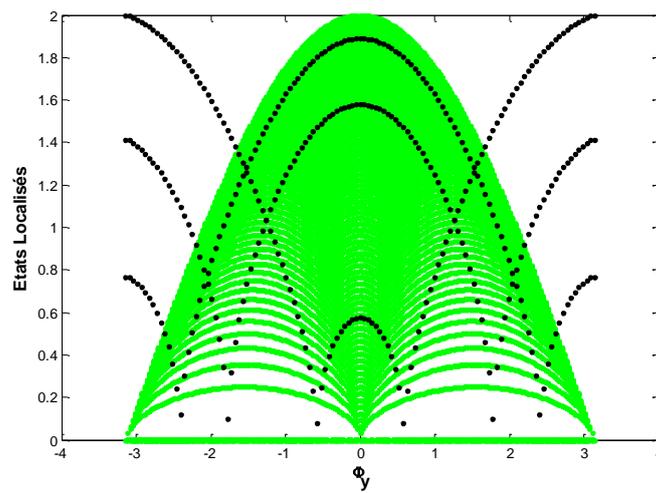


Figure IV. 21. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

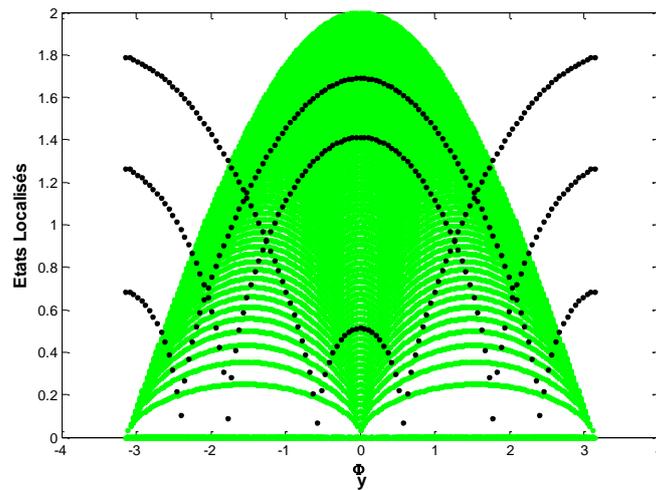


Figure IV. 22. Etats localisés dans le cas du mode d'adoucissement.

IV.2.5.4. Densité d'état

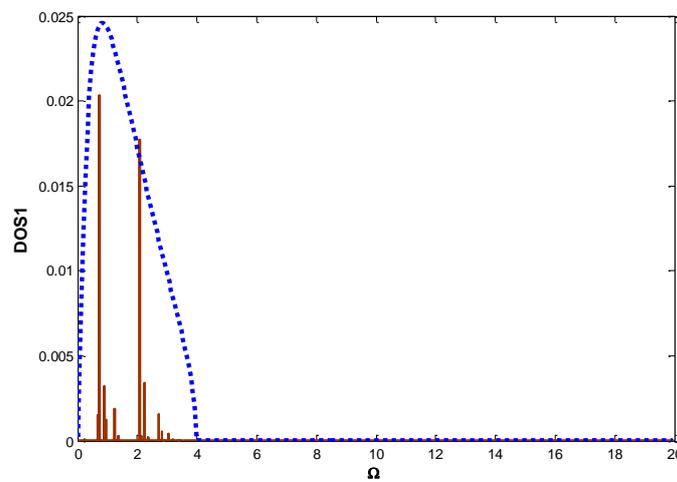


Figure IV. 23. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω .

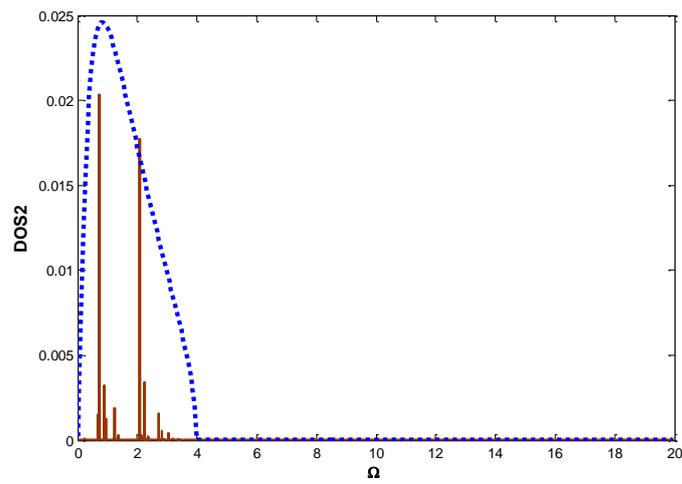


Figure IV. 24. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω .

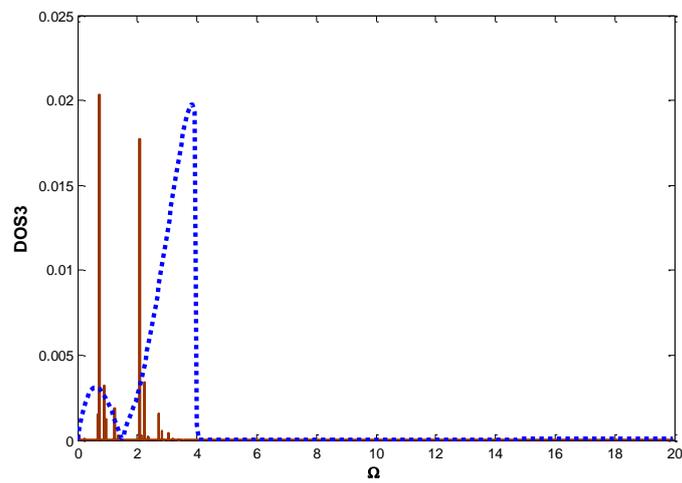


Figure IV. 25. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω .

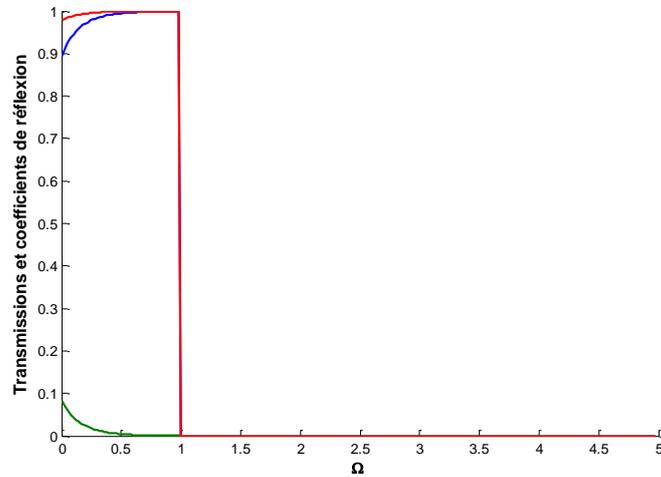
IV.2.6. diffusion (Une couche mince trois plans insérées)**IV.2.6.1. Coefficients de transmission et de réflexion**

Figure IV.26. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode durcissement

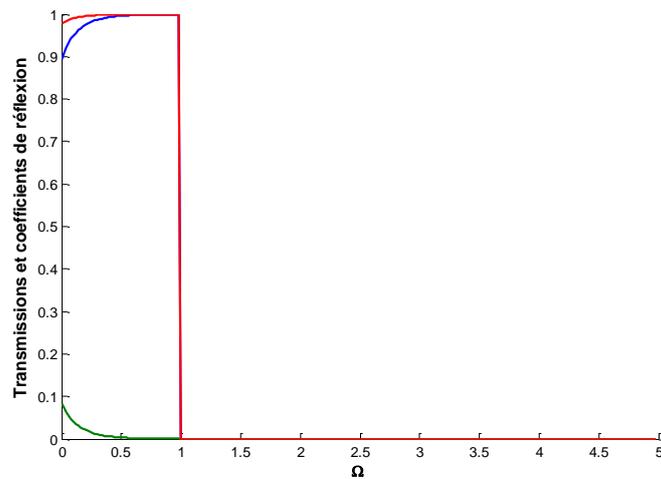


Figure IV.27. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode homogène.

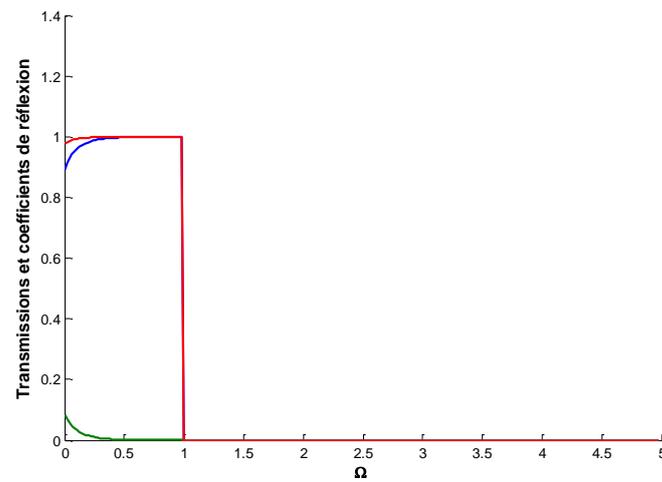


Figure IV.28. Coefficients de transmission et de réflexion dans le cas du mode de d'adoucissement

IV.2.6.2. Conductance électronique

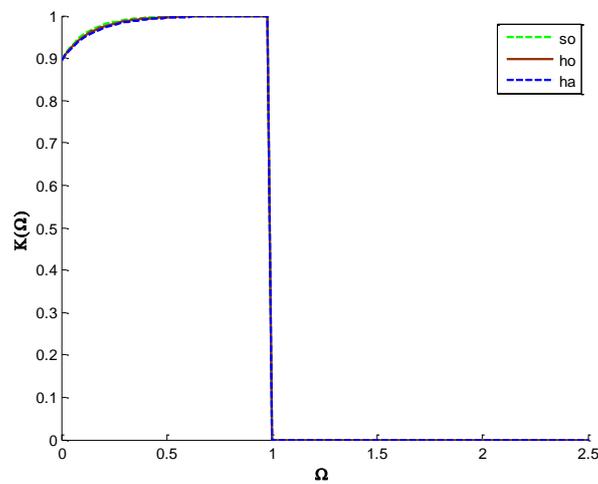


Figure IV. 29. Conductance électronique ou transmittance en tant que fonction sans dimension Ω et des intégrales de saut de Harrison.

IV.2.6.3. Etats localisés

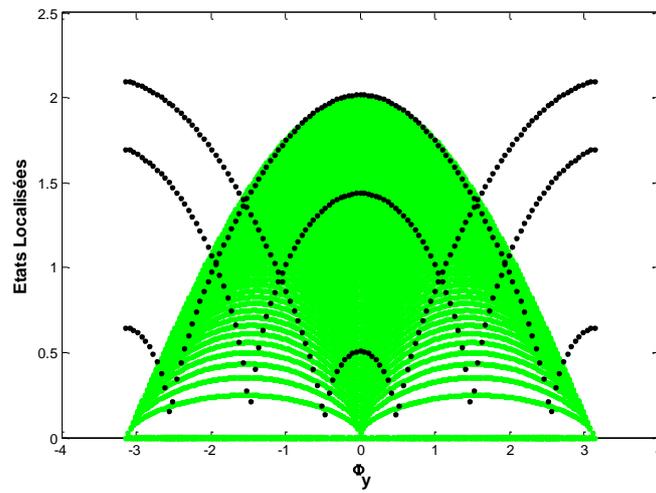


Figure IV. 30. Etats localisés dans le cas du mode durcissement.

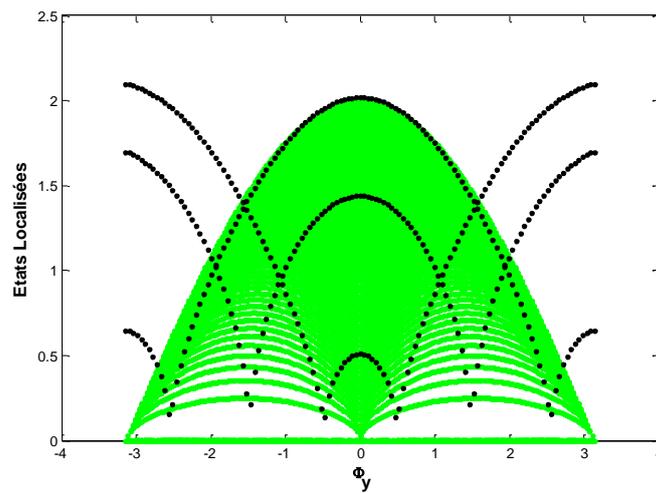


Figure IV. 31. Etats localisés dans le cas du mode homogène.

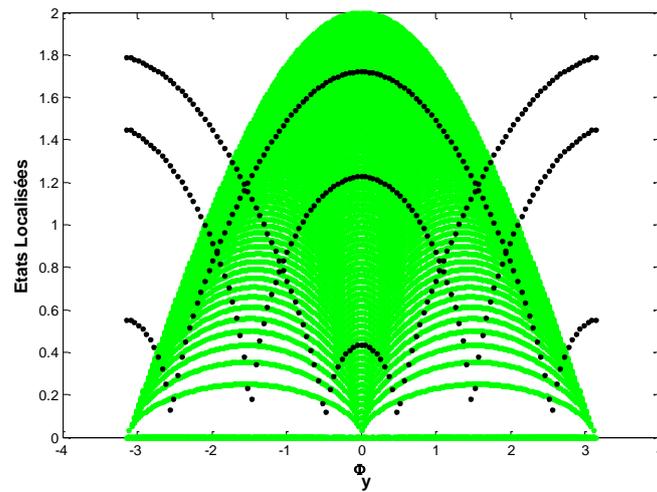


Figure IV. 32. Etats localisés dans le cas du mode de d'adoucissement.

IV.2.6.4. Densité d'état

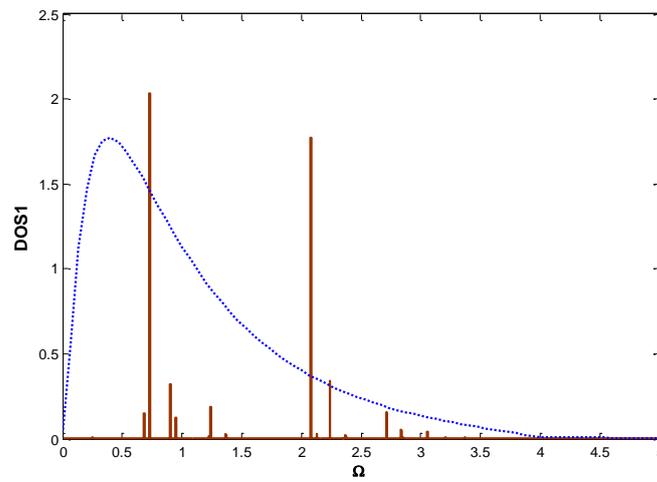


Figure IV. 33. Densité d'état pour atome 1 en fonction Ω .

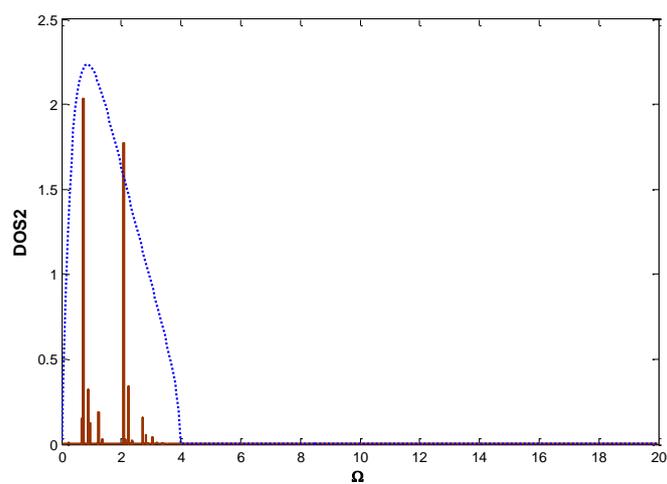


Figure IV. 34. Densité d'état pour atome 2 en fonction Ω .

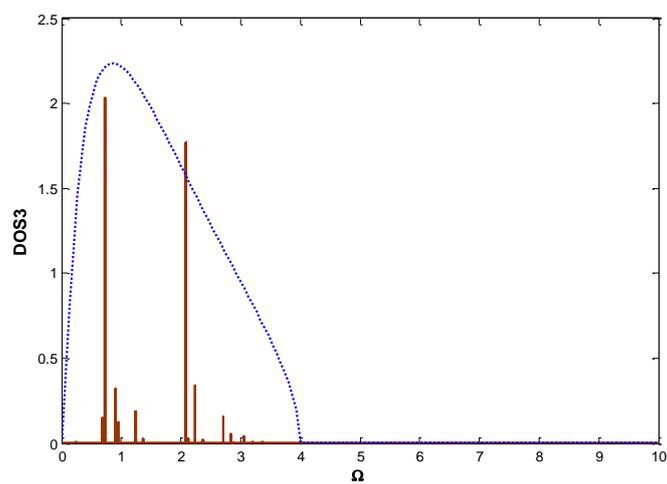


Figure IV. 35. Densité d'état pour atome 3 en fonction Ω .

IV.3. Résultats et discussion

Dans la figure IV.2, nous avons calculé la dispersion en fonction de ϕx . Nous remarquons une diminution puis une augmentation de la valeur de Ω à mesure que la courbe forme une symétrie par rapport à l'axe de l'arrangement au point 0.

Dans la figure IV.3, nous avons effectué le calcul des facteurs de phase en fonction de w , où la valeur d'Abs Z est initialement fixée à 1, puis elle diminue à mesure que la valeur de Ω augmente.

La figure IV.4 représente la courbe du facteur de phase, et quant à la Vitesse de groupe, nous l'avons dessiné en figure IV.5.

Coefficients de transmission et de réflexion est dessiné sur la figure 6-8 dans le cas de durcissement, Homogène et d'adoucissement respectivement, où la différence est claire dans la courbe du dans la définition de la courbe, détaillant les gradations et la sensibilité qui est claire dans ce cas.

Sur la figure 9, nous avons présenté la conductance électronique ou transmittance en fonction de la fréquence Ω et des intégrales de saut de Harrison du système perturbé. Ces valeurs augmentent respectivement de l'adoucissement jusqu'au durcissement des paramètres de défaut.

En ce qui concerne les états situés, nous les avons représentés dans les figures 10 à 12. Les branches de ces états sont observées se déplacer vers les fréquences élevées de l'adoucissement au durcissement des intégrales de saut de Harrison.

Nous établissons rigoureusement une cartographie complète du champ électronique autour du défaut atomique en utilisant la méthode du raccordement. L'avantage spécifique de notre méthode de raccordement, par rapport à d'autres méthodes comme l'approche numérique Slab, et en plus d'être transparente à toutes les étapes du calcul, est qu'elle donne une formulation analytique exacte et rigoureuse des paramètres de Harrison du champ électronique dans la limite de infini. Il n'y a pas d'approximations numériques. Les états électroniques au voisinage de défaut étendu sont donc calculés selon un schéma numérique efficace. La méthode fournit également les spectres électroniques dans l'espace réel, pour les sites atomiques qui caractérisent bien le nano matériaux. Les spectres calculés pourraient

fournir, en comparaison avec les résultats expérimentaux à venir, des informations utiles concernant les paramètres de Harrison du défaut atomique. On constate que pour tous les sites les courbes de densité d'état présentent des oscillations de Fabry Perrot dues aux interactions des états localisés avec ceux du volume.

Les coefficients de transmission et de réflexion sont sensibles à la variation des paramètres de Harrison. On observe une diminution des transmissions avec leur augmentation contrairement à celles de la réflexion.

Enfin, nous avons tracé des courbes de densité d'état pour les atomes voisins, et cela a été fait dans le cas de 1plan, 2plans et 3plans insérés.

Références bibliographiques

- [1] J. Szeftel and A. Khater, *Calculation of surface phonons and resonances: the matching procedure revisited: I*, J. Phys. C 20, 4725 (1987).
- [2] A. Khater, N. Auby, and R. F. Wallis, Surf. Sci. 217, 563 (1989). 13A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, and A. Khater, *Etude dynamique des nanocontacts*, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [3] Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A. Virlovet, and K. Maschke, *The scattering and transmission of elastic waves in quasi-two-dimensional planar waveguides with linear defect boundaries*, Eur. Phys. J. B 15, 435 (2000).
- [4] A. Khater, L.Saim, R. Tigrine, D.Ghader, *Fabry–Perot magnonic ballistic coherent transport across ultrathin ferromagnetic lamellar bcc Ni nanostructures between Fe leads*, Surface Science 672-673 (2018) 47-55.
- [5] Lamia Saim, Elie A. Moujaes, Antoine Khater, Rachid Tigrine, *Spin dynamics and magnonic characteristics of a magnetically ordered fcc Fe-Ni alloy monolayer on an fcc Ni slab substrate*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 511 (2020) 166958.
- [6] Virlovet, Ph.D. thesis, Université du Maine (1997).
- [7] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957)
- [8] R. Landauer, *Electrical transport in open and closed systems*, Philos. Mag. 21, 863 (1970) 19.
- [9] M. Büttiker, *Coherent Andreev reflection in disordered normal conductors coupled to superconductors*, Phys. Rev. Lett. 57, 1761 (1986)
- [10] A. Maradudin, E. W. Montrol, G. H. Weiss, and I. P. Ipatova, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation, Solid State Physics*, Suppl. 3 (Academic Press, New York, 1971).

Conclusion générale

Conclusion générale

Un modèle théorique, la théorie de raccordement de champ de phase (PFMT), a été utilisé pour étudier les états localisés, leurs états associés, la densité d'états vibrationnelle locale (LVDOS), la conductance cohérente et la conductivité thermique associée du quasi-film ultra mince perturbé. réseau cristallin dimensionnel. Le défaut perturbe la symétrie de translation du système dans la direction perpendiculaire à celui-ci, qui est l'axe Ox , et induit un état localisé dans son comportement qui n'est pas présent dans la masse, dispersant l'onde élastique incidente. Nous avons analysé notre modèle pour trois cas différents de paramètres élastiques : adoucissement, homogène et durcissement. L'objectif est d'étudier comment la dynamique locale peut répondre aux changements de l'environnement microscopique dans le domaine perturbé. L'analyse des spectres de conductance phononique totale et des états de densités vibratoires locales identifie des caractéristiques distinctives et démontre l'utilisation potentielle du capteur dans le contrôle non détruit.

Les propriétés des surfaces et des interfaces suscitent un intérêt scientifique, ce qui nous a incité à élaborer une approche théorique et de simulation numérique pour traiter les phénomènes de localisation et de diffusion d'ondes de spin dans des structures magnétiques mésoscopiques désordonnées. Cette méthode repose principalement sur une méthode appelée « méthode de raccordement », qui a été initialement adaptée à l'analyse des phénomènes vibrationnels.

En utilisant un Hamiltonien d'Heisenberg simple pour décrire toutes les interactions premiers voisins en absence de champ magnétique total, nous avons pu observer comment certains défauts magnétiques (interface et marche magnétique) influencent les propriétés de localisation et de diffusion des ondes de spin dans des guides d'onde ferromagnétiques quasi-bidimensionnels. Dans un premier temps, nous avons réalisé une évaluation des caractéristiques dynamiques des guides d'ondes parfaits (sans défauts). Ensuite, en employant la méthode de raccordement et en effectuant des simulations numériques, nous avons effectué un calcul des états des magnons situés à proximité des défauts examinés, puis un calcul de la densité des états des spins qui constituent les zones perturbées, et enfin un calcul des grandeurs physiques de celle-ci.

Dans un premier temps, nos résultats numériques ont révélé l'émergence de nouveaux états de magnons situés à proximité des défauts examinés. Il est important de souligner que le nombre et le genre de branches des états localisés qui se manifestent sont fortement influencés par les divers paramètres physiques qui jouent un rôle dans le calcul des équations du mouvement de précession des spins. De cette manière, nous avons démontré que lorsque le rapport de spins γ est inférieur à 1, nous avons des branches acoustiques qui se distinguent par des valeurs d'énergie élevées. En revanche, lorsque le rapport de spins γ est supérieur à 1, nous avons des branches optiques qui se distinguent par des valeurs d'énergie faibles.

Les résultats concernant les densités d'état des magnons des spins qui constituent les régions de défaut ont révélé la présence de plusieurs pics à des énergies spécifiques. Certains d'entre eux sont liés à divers états de magnons localisés qui se manifestent à proximité des défauts en question. Certains sont des pics de résonance causés par des interactions de type Fano. Elles témoignent d'un lien interférentiel entre des modes propagateurs et des modes discrets engendrés par la présence de défauts.

En ce qui concerne l'analyse de la diffusion, les résonances de Fano sont les structures les plus remarquables dans les différentes courbes de transmission obtenues. De plus, une étude sur la conductance magnonique des défauts examinés a révélé que celle-ci est grandement influencée par les divers paramètres du système. Par exemple, nous avons démontré que l'influence de l'angle d'incidence ϕ_y sur la conductance magnonique σ se traduit par une variation des courbes $\sigma(\Omega)$ vers les énergies élevées lorsque ϕ_y augmente. De plus, la variation de l'intensité de σ par rapport à ϕ_y est inversement proportionnelle.

En tant que perspective, notre objectif est d'abord de développer la méthode de raccordement pour qu'elle puisse être utilisée dans des systèmes plus étendus en introduisant des défauts à deux, voire trois dimensions. Il serait également intéressant de revoir les recherches que nous avons menées en utilisant un traitement purement quantique et de prendre en compte certains paramètres que nous avons négligés, tels que le champ magnétique appliqué, le champ d'anisotropie et l'interaction d'échange que nous avons restreint aux voisins les plus proches. Finalement, nous avons également prévu de mesurer

d'autres dimensions physiques captivantes, comme la chaleur spécifique des magnons ; la variation relative de l'aimantation... etc.

En développant cette théorie, nous avons pu mettre en évidence l'impact de certains défauts magnétiques sur les propriétés de localisation et de diffusion d'ondes en utilisant un Hamiltonien d'Heisenberg simple qui décrivait toutes les interactions premiers voisins en absence de champ magnétique total. Tout d'abord, nous avons réalisé un calcul des caractéristiques dynamiques. Par la suite, en employant la méthode de raccordement et en effectuant des simulations numériques, nous avons effectué un calcul des états de magnons situés à proximité des défauts examinés, puis un calcul de densité d'états et enfin un calcul des grandeurs physiques de diffusion.

Les résultats concernant les densités d'états de magnons ont démontré la présence de plusieurs pics à des énergies spécifiques. Certains d'entre eux sont liés à divers états de magnons localisés qui se manifestent à proximité des défauts en question. Certains sont des pics de résonance causés par des interactions de type Fano. Elles témoignent d'un lien interférentiel entre des modes propageants et des modes discrets engendrés par la présence de défauts.

En ce qui concerne l'analyse de la diffusion, les résonances de Fano sont les structures les plus remarquables dans les différentes courbes de transmission obtenues. De plus, une étude sur la conductance magnonique des défauts examinés a révélé que celle-ci est grandement influencée par les divers paramètres du système. Par exemple, nous avons démontré que l'influence de l'angle d'incidence ϕ_y sur la conductance magnonique σ se traduit par une variation des courbes $\sigma(\Omega)$ vers les énergies élevées lorsque ϕ_y augmente. De plus, la variation de l'intensité de σ par rapport à ϕ_y est inversement proportionnelle.

Dans le futur, notre objectif est d'abord de développer la méthode de raccordement pour qu'elle puisse être appliquée à des systèmes plus étendus en introduisant des défauts à deux, voire trois couches. En revanche, il serait judicieux de revoir les recherches que nous avons menées en utilisant un traitement purement quantique et de prendre en compte certains paramètres que nous avons négligés, tels que le champ magnétique appliqué, le champ

d'anisotropie et l'interaction d'échange que nous avons restreinte aux voisins les plus proches d'eux. Nous avons également l'intention de calculer d'autres dimensions physiques captivantes, comme la chaleur spécifique des magnons ; la variation relative de l'aimantation... etc.

Résumé

Dans la présente étude, nous avons utilisé le formalisme de raccordement qui est un outil puissant pour traiter les problèmes avec brisure de symétrie. Nous avons calculé les différentes propriétés en occurrence dynamique de réseau, magnétique et électronique. On a choisi comme système à étudier un film mince avec des défauts implantés respectivement n plans avec $n=1,3$. Dans le cas des propriétés dynamiques de réseaux nous avons considéré du polonium(Po) avec des plans intégrés de cuivre (Cu). Pour les propriétés magnétiques nous avons considéré une couche mince de fer (Fe) avec des plans intégrés de Nickel, dans l'approximation de configuration cubique simple (CS). Pour les trois cas nous avons calculé les propriétés de volume à savoir la fonction dispersion en fonction de l'angle d'incidence ϕ_y , les valeurs propres absolues Z en fonction de la fréquence Ω ainsi que la vitesse de groupe de déplacement des états propageant. Nous avons tracé la représentation 3D de facteur de phase Z , celle-ci est plus complète, elle nous renseigne sur son module et sa phase. Nous avons aussi déterminé les différentes propriétés au voisinage de défaut en occurrence : dynamique de réseau ; magnétiques et propriétés électroniques. Les propriétés génériques de diffusion et de localisation au niveau d'une nanostructure intégrée dans un modèle de système inhomogène sont étudiées par la technique de raccordement dans l'approximation des premiers et seconds voisins.. Les résultats montrent que les conductances du système et les coefficients de réflexion et de transmission varient sensiblement avec les fréquences Ω et les paramètres du défaut atomique. Aux fréquences plus basses, la conductance commence à sa valeur maximale, diminue avec l'augmentation de Ω et disparaît à la limite de la zone Brillouin. Ces spectres peuvent apporter, d'un point de vue théorique et expérimental, des informations utiles concernant les paramètres au voisinage du défaut et sa nature spécifique.

Les branches des états localisés au voisinage de défaut s'évanouissent de part et d'autre du défaut et se propagent selon la direction de haute symétrie de la nanostructure. Leurs nombres dépendent de la nature et la configuration du système. Ils se déplacent des basses vers les hautes fréquences avec l'augmentation des paramètres au niveau de la zone de défaut respectivement les constantes élastiques, intégrales d'échange et intégrales de saut de Harrison. Nous avons aussi calculés les conductivités thermiques associées respectivement aux conductances phononique, magnonique et électronique du système étudié. C'est une grande importance mesurable notamment en microélectronique où l'effet thermique est néfaste aux éléments des dispositifs des systèmes. D'un point de vue théorique et pratique, ces spectres pourraient offrir des informations inestimables sur les différents paramètres entourant le domaine du défaut atomiques.

Mots clés

Couches minces, systèmes de basse dimension, méthode de raccordement ; modèle de Heisenberg, magnétisme, dynamique du réseau, méthodes des liaisons fortes, formalisme Landauer-Büttiker, DOS, fonctions de Green, propriétés électroniques des systèmes à brisure de symétrie.

Abstract

In the present study, we used the connection formalism which is a powerful tool for dealing with problems with symmetry breaking. We calculated the different properties in lattice dynamic, magnetic and electronic occurrence. We chose as a system to study a thin film with defects implanted respectively in n planes with $n=1,3$. In the case of dynamic network properties we considered polonium (Po) with integrated planes of copper (Cu). For the magnetic properties we considered a thin layer of iron (Fe) with integrated planes of Nickel, in the simple cubic configuration (CS) approximation. For the three cases we calculated the volume properties, namely the dispersion function as a function of the angle of incidence ϕ , the absolute eigenvalues Z as a function of the frequency Ω as well as the group speed of movement of the propagating states. We have traced the 3D representation of phase factor Z , this is more complete, it tells us about its module and its phase. We also determined the different properties in the vicinity of the fault occurring: network dynamics; magnetic and electronic properties. The generic diffusion and localization properties at the level of a nanostructure integrated into an inhomogeneous system model are studied by the patching technique in the first and second neighbors approximation. The results show that the system conductances and coefficients reflection and transmission vary significantly with the frequencies Ω and the parameters of the atomic defect. At lower frequencies, the conductance starts at its maximum value, decreases with increasing Ω , and disappears at the edge of the Brillouin zone. These spectra can provide, from a theoretical and experimental point of view, useful information concerning the parameters in the vicinity of the defect and its specific nature.

The branches of the states located in the vicinity of the defect vanish on either side of the defect and propagate along the direction of high symmetry of the nanostructure. Their numbers depend on the nature and configuration of the system. They move from low to high frequencies with the increase in parameters at the fault zone, respectively the elastic constants, exchange integrals and Harrison jump integrals. We also calculated the thermal conductivities associated respectively with the phononic, magnonic and electronic conductances of the system studied. This is a very important measure, particularly in microelectronics where the thermal effect is harmful to the elements of the system devices. From a theoretical and practical point of view, these spectra could offer invaluable information on the different parameters surrounding the atomic defect domain.

Keywords

Thin layers, low-dimensional systems, connection method; Heisenberg model, magnetism, network dynamics, strong bond methods, Landauer-Büttiker formalism, DOS, Green functions, electronic properties of symmetry-breaking systems.