

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU
FACULTE : DES SCIENCES
DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE



MEMOIRE DE MAGISTER

SPECIALITE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE DES MATERIAUX

Présenté par :

Rachid RABHI

Sujet :

Impact des défauts de structure sur la dynamique des spins dans un système tubulaire quasi-1D

Soutenu le : **30/04/2012.**

Devant la commission d'examen composée de :

Mr Slimane Hellal	Professeur (Université M. Mammeri)	Président
Mr Boualem Bourahla	Maître de Conférences (A) (Université M. Mammeri)	Rapporteur
Mr Rachid Tigrine	Professeur (Université M. Mammeri)	Examineur
Mr Rabah Mokdad	Professeur (Université M. Mammeri)	Examineur
Melle Leila Messad	Maître de Conférences (B) (Université M. Mammeri)	Examinatrice

Remerciements

Le travail de mémoire présenté a été effectué au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (L.P.C.Q) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements à Monsieur Bourahla Boualem qui a dirigé sans relâche mon travail avec beaucoup de compétence et de patience. Ses qualités humaines et ses remarques m'ont été précieuses. Qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le professeur Slimane Hellal pour avoir accepté de présider ce jury de magister. Merci également à Messieurs les professeurs Rachid Tigrine et Rabah Mokdad, et au docteur Melle Leila Messad, de m'avoir fait l'honneur de contribuer à l'examen de ce travail en participant au jury.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui ont contribué de loin ou de près à la réalisation de ce travail, en citant les membres de LPCQ, en particulier les étudiants de magister et les doctorants, sans oublier l'ensemble du personnel de la faculté des sciences et du département de physique de l'université M. Mammeri qu'il trouve ici l'expression de mes remerciements. Je suis reconnaissant à l'égard de mes amis qui m'ont toujours soutenu et encouragé en toutes circonstances.

Je témoigne enfin toute ma reconnaissance à ma famille, mes parents, ma sœur Razika et son mari Mustapha, à mes frères et à ceux (frères) avec leurs petites familles et à tous les enseignants (es) et adjoint (es) d'éducatifs avec qui j'ai travaillé, pour m'avoir soutenu tout au long de ce travail.

SOMMAIRE

Introduction générale	4
Chapitre I : Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques	
I.1/ Introduction	9
I.2/ Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques ordonnés	9
I.2.1/ Propriétés de symétrie	9
I.2.2/ Equations de mouvement et matrice dynamique	10
I.3/ Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques désordonnés	14
I.3.1/ Rappel	14
I.3.1.a/ La méthode de diagonalisation direct (Slab method)	14
I.3.1.b/ La méthode des fonctions de Green	14
I.3.1.c/ La méthode de raccordement	15
I.4/ Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut magnétique	16
I.4.1/ Principe de la méthode	16
I.4.2/ Formulation du problème	17
Références	20
Chapitre II : Dynamique des spins d'un guide d'onde parfait à forme tubulaire	
II.1/ Introduction	21
II.2/ Présentation du modèle	22
II.3/ Dynamique des spins dans les régions de volumes loin du défaut	23
II.3.1/ Equations de mouvement	23
II.3.1.1/ Les équations de mouvement	23
II.3.1.2/ Relation de dispersion	24
II.4/ Courbe de dispersion	26
II.5 / Discussion des courbes	27
II.6/ Vitesses de groupe	28
II.7/ Modes atténués	29
Références	31
Chapitre III: Excitations magnétiques dans les systèmes tubulaires perturbés	
Introduction	32
III .I/ Diffusion d'ondes de spin en présence d'un défaut atomique	32
III .I.1/ Description du modèle	33
III.1.2/ Matrice dynamique du système tubulaire perturbé	34
III.1.3/ Matrice de raccordement	36
III.1.4/ Etude de la diffusion	38
III.1.4.1/ Calcul des coefficients de transmission et de réflexion	39
III.1.4.2/ Conductance magnonique	41
III.1.4.3 / Les résultats obtenus pour la transmission totale de magnon en présence des trois défauts (Substitution - lacunes - dépôt atomique)	42
III.1.4.4 / Discussion des courbes	50
III.2/ Etats des magnons localisés	54
III.2.1/ Etats des magnons localisés au voisinage du défaut atomique	54
III.2.2/ Résultats obtenus	54
III.2.3/ Discussion des résultats	58
Référence	61

Chapitre IV : Densités spectrales et densités d'états magnoniques

I.1/ Introduction	62
IV. 2/ Densités magnoniques	62
IV.2.1/ Méthode de calcul	62
IV.2.2/ Résultats obtenus	63
IV.2.2/ i) Substitution d'atomes	64
IV.2.2/ ii) Défaut lacunaire	66
IV.2.2/ iii) Dépôt d'atomes	67
IV.2.3/ Discussion des résultats	69
Référence	72
Conclusion et perspectives	73
Annexes	
Annexe A : Calcul de la vitesse de groupe	75
Annexe B : Formes explicites des matrices issues d'augmentation de base	77
Annexe C : Les éléments de la matrice des fonctions de Green	79

INTRODUCTION GENERALE

La recherche scientifique sur les systèmes de dimensionnalités réduites (films minces, fils et boîtes quantiques, systèmes nanostructurés, surfaces,...) a connu un grand essor pendant ces dernières années sur le double plan fondamental et appliqué. Cette croissance est étroitement liée aux besoins de la science et de la technologie moderne. Dans le domaine de l'information et de la communication, les propriétés de ces nouveaux systèmes sont très sensibles à l'environnement local. Par conséquent, la miniaturisation des dispositifs constitue un véritable saut technologique. Elle a contribué considérablement à accroître la densité de stockage et l'efficacité des composants [1].

L'évolution continue, depuis une vingtaine d'années, la plupart des travaux sont orientés vers l'étude des systèmes magnétiques de très faibles dimensions et des systèmes magnétiques infiniment petits et elle sera durable dans ce sens. Ce choix est dicté surtout par l'apparition aux échelles de longueurs nanométriques de nouveaux effets physiques et de nouvelles propriétés [2-10]. Les couches minces et les films ultraminces et nanofils, présentent de par leurs faibles dimensions des propriétés quantiques nouvelles basées sur la diffusion électronique dépendant du spin des électrons débouchant sur les effets de valve de spin et des effets tunnel magnétiques. Ces propriétés sont ajustables en fonction des paramètres comme l'épaisseur des couches, la nature des métaux en contact, ou la concentration des constituants dans les couches d'alliages, ce qui permet une véritable ingénierie de matériaux synthétiques nouveaux. Ces structures artificielles ont des applications potentielles dans le domaine des capteurs ou du stockage des données [11-12].

Malgré les progrès enregistrés ces dernières années dans les techniques de préparation et d'élaboration des systèmes, ces derniers présentent toujours des défauts atomiques. Ces défauts vont induire la modification de propriétés physiques.

Cette observation est confirmée par des techniques expérimentales d'exploration, comme les microscopes à effet tunnel (S.T.M) ou à force atomique (A.F.M) qui offrent une vision directe de la morphologie des systèmes. La recherche théorique dans le domaine des nanostructures s'est focalisée pour une grande partie sur l'étude des propriétés électroniques. L'exemple le plus étudié, pour des raisons qui tiennent à l'histoire et à l'intérêt technologiques, est celui de la conduction électrique dans des systèmes mésoscopiques. La résistance de tels composés, dont les dimensions sont de l'ordre du nanomètre, ne peut pas être prédite par la théorie classique du transport. Pour la comprendre il faut se placer dans un cadre quantique et tenir

compte des phénomènes d'interférences se produisant lors de la superposition des fonctions d'ondes électroniques. Landauer a proposé une approche de ce problème qui s'est révélée particulièrement riche et adaptée [13-14]. Il a montré que la conductance d'un fil quantique est directement liée aux propriétés de diffusion d'un tel système considéré comme un guide d'ondes perturbé par des défauts de structure. Sur le plan expérimental, les nanostructures et les films minces sont souvent réalisés à l'état polycristallin pour des applications bien précises, comme en microélectronique, par exemple [15]. Ces systèmes sont considérés comme des modèles pour l'étude des phénomènes physiques et chimiques liés à la présence de la surface et des interfaces.

Du point de vue fondamental, de nombreux auteurs ont étudié plusieurs modèles pour des systèmes souvent traités comme quasi-unidimensionnels, et ils ont mis en évidence à l'aide de méthodes numériques des phénomènes intéressants [16-17]. Dans le domaine magnétique, les travaux réalisés [18-19] ont pour objet d'étudier les excitations magnétiques, en examinant le mouvement de précession des spins pour relever les effets de l'interaction entre les états du continuum et les états localisés, au voisinage des défauts, et la diffusion de magnons via les nanostructures implantées. Celles-ci provoquent l'apparition de plusieurs types de résonances dans les courbes de conductance en fonction de l'énergie. Ils ont constaté que la diffusion d'ondes de spins par les défauts produit des phénomènes analogues à ceux observés dans le cas électronique [20-23].

L'objectif de ce travail est de contribuer à une meilleure compréhension du mouvement de précession des spins dans des systèmes ayant des formes tubulaires quasi-unidimensionnel en présence de défauts atomiques, jamais examiné à ce jour. Notre étude théorique est basée sur la simulation numérique, qui permettra d'étudier la dynamique des systèmes tubulaires composés de quatre chaînes atomiques disposés parallèlement dans l'espace deux à deux ; nous déterminons en particulier les états de précession localisés de spin et la diffusion d'ondes de spin dans ces structures ferromagnétiques en présence d'inhomogénéités atomiques. Le but est de relever l'impact de défauts atomiques sur la dynamique des systèmes tubulaires. Nous nous intéressons particulièrement, la présence de trois types de défauts atomiques : le premier consiste à substituer des atomes par d'autres dans les systèmes tubulaires parfaits, ensuite nous examinerons le cas de la présence de lacunes atomiques conduisant à la formation d'un nanocontact atomique ; et le troisième est un dépôt atomique sur une double chaîne atomique qui est la facette de la structure. Tout le long de ce travail, nous tenons compte uniquement des interactions entre spins premiers voisins.

L'existence de défauts provoque la perte de la symétrie de la structure et rend le formalisme basé sur les conditions aux limites de Born et Von Karman inapplicable, d'où la nécessité d'une méthode appropriée qui permet de limiter le nombre d'équations et d'inconnus. Parmi ces méthodes, nous citons la méthode dite de raccordement sur laquelle s'appuiera notre modélisation ; qui est associée aux fonctions de Green permettra de calculer certaines propriétés physiques intéressantes, comme les densités spectrales locales et les densités d'états magnoniques. La présence d'états de magnons localisés dus aux défauts dans les systèmes ferromagnétiques, a été mise en évidence par analogie avec les vibrations cristallines [24-27]. Depuis des efforts ont été développés pour la compréhension du comportement des excitations magnétiques [3, 28-31].

Le premier chapitre, de ce mémoire, est réservé à la description de la méthode utilisée pour l'étude de la dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques et des excitations magnétiques dans les structures de dimensions réduites. Elle s'appuie principalement sur l'approche théorique de raccordement développée par le Pr A. Khater et ses collaborateurs ces dernières années. Il existe, bien entendu, d'autres méthodes théoriques disponibles dans la littérature scientifique pour traiter les sujets d'étude, et nous faisons mention de certaines de ces méthodes dans ce chapitre.

Le deuxième chapitre constitue une application directe du formalisme rappelé au chapitre précédent. Il traite la dynamique de spins d'un guide d'onde parfait ferromagnétique ordonné dans une structure à forme tubulaire composé de quatre chaînes atomiques disposés parallèlement deux à deux. On définit les courbes de dispersion magnoniques et leurs modes propageant et évanescents et nous introduisons les vitesses de groupe indispensables pour l'étude de la diffusion. Elles seront utilisées lors de la normalisation des grandeurs physiques telles que les coefficients de réflexion et de transmission [5].

Le chapitre trois est consacré à la détermination des états localisés de spin au voisinage des trois défauts évoqués précédemment et à l'étude de la diffusion d'ondes de spin en présence des inhomogénéités dans le guide d'ondes parfait ferromagnétique de forme tubulaire. L'étude est réalisée pour les différentes valeurs du paramètre d'échange magnétique dans la zone perturbée à savoir : l'adoucissement, l'homogénéité et le durcissement.

La première partie est consacrée au défaut de substitution de deux atomes dans le système tubulaire parfait ; nous calculons la transmission totale appelée conductance ou transmittance

magnonique du système, puis nous déterminerons les états localisés de spin au voisinage de la zone contenant les atomes substitués. Dans la deuxième partie, nous reprenons le même travail que la première partie mais pour un autre défaut qui est lacunaire. De la même façon, à la troisième partie, nous examinons l'impact d'un dépôt atomique sur les propriétés magnétiques calculés. L'interaction entre les états propageant du continuum et les états localisés induits par les différents défauts étudiés fait apparaître des résonances de type Fano comme observé dans le transport électronique.

Au quatrième chapitre, nous associons l'opérateur de fonction de Green d'une manière compacte à la méthode de raccordement afin de calculer les densités spectrales locales et les densités d'états magnoniques au niveau de la zone perturbée et cela pour trois possibilités de l'échange magnétique, à savoir : l'adoucissement, l'homogénéité globale du système et enfin le cas de durcissement des intégrales d'échanges.

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

Nous avons repoussé en annexes quelques développements secondaires qui auraient inutilement alourdi notre travail. Ainsi nous avons rappelés les différentes méthodes utilisées pour le calcul de la vitesse de groupe d'une onde de spin ferromagnétique en annexe A. En annexe B, nous avons fait un rappel sur la méthode utilisée pour remonter aux matrices d'augmentation de base, et enfin, nous avons fait aussi un rappel sur la méthode qui permet de calculer les densités spectrales et densités d'états magnoniques en annexe C.

Références

- [1] S. Amoudache, Mémoire de Magister, Université de Houari Boumediene (2005)
- [2] R. Chadli, Mémoire de Magister, Université de Tizi Ouzou (2004)
- [3] A. Khater and M. Abou.Ghantous. Surf. Sci. Lett. 498, L97 (2002)
- [4] K. Xia, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, I. Turek, J. Kudrnovsky and V. Drchal. Phys. Rev. B 63, 064407(2001)
- [5] K. M. Schep, J. B. A. N. Van Hoof, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, J. E. Inglesfield. J. Mag. Mag. Mat. 177-181, 1166 (1998)
- [6] Hyunbum Jang and Malcolm J. Grimson. J. Phys. Condens. Mat.10, 9641(1998)
- [7] ZhengGai, G. A. Farnan, J. P. Pierce, and J. Shen. Appl. Phys. Lett. 81, 742 (2002)
- [8] Z. K. Wang, M. H. Kuok, S. C. Ng, D. J. Lockwood, M. G. Cottam, K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, and U. Gösele. Phys. Rev. Lett. 89, 2 (2002)
- [9] Y. B. Xu, M. Tselepi, J. Wu, S. Wang, J. A. C. Bland, Y. Huttel, and G. Van Der Laan. IEEE Transactions On Magnetics.8, 2652 (2002)
- [10] L. Diekhöner, M. A. Schneider, A. N. Baranov, V. S. Stepanyuk, P. Bruno, and K. Kern. Phys. Rev. Lett. 90, 23 (2003)
- [11] D. Zhao, Feng Liu, D.L. Huber, and M. G. Lagally, J. Appl. Phys. 91, 5 (2002)
- [12] S. P. Li, M. Natali, A. Lebib, A. Pépin, Y. Chen, Y. B. Xu, J. Mag. Mag. Mat. 241, 447 (2002)
- [13] R. Landauer, Philos. B .68, 217 (1970)
- [14] R. Landauer, Z. Phys. B. 68, 217 (1987)
- [15] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri (2007)
- [16] Buttiker. Phys. Rev. Lett, 57. 1761 (1986)
- [17] K. L. Shepard, M. L. Roukes, et B. P. Van dergaag, Phys. Rev. B 46, 9648 (1992)
- [18] Tekman et P. F. Bagwel, Phys. Rev. B 48, 4 (1999)
- [19] C. Berthod, F. Gagel, et K. Maschke, Phys. Rev. B 50, 18299 (1994)
- [20] A. Khater et W. Czaja, Physica. B 167, 33 (1990)
- [21] A. Khater, N. Auby et D. Kechrakos, J. Phys. Condens. Mat. 4, 3743 (1992)
- [22] B. Djafari-Rouhani, P. Masri, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 15, 5690 (1977)
- [23] A. Akjouj, L. Doberzenski, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur and M. S. Kushwaha, Eur. Lett, 41, 321 (1998)
- [24] R. E. De Wames and T. Wolfram. Phys. Rev. 185, 2 (1969)
- [25] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, and R. Chadli, Eur. Phys. J. B 82, 53 (2011)
- [26] E. Ilisca et E. Gallais, Le Journal de Physique. Tome 35, 812 (1972)
- [27] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam. Sol. St. Com., 76, 437 (1990)
- [28] M. Abou. Ghantous and A. Khater, Eur. Phys. J. B 12, 335 (1999)
- [29] M. Belhadi, A. Khater, Surf. Rev.Lett.11, 99 (2004)
- [30] R. Lai, S. A. Kiselev, and A. J. Sievers, Phys. Rev. B56, 9 (1997)
- [31] P. Böni, B. Roessli, D. Görlitz and J. Kötzler, Phys. Rev. B 65, 144434 (2002)

Chapitre I

DYNAMIQUE DES SPINS DANS LES SYSTEMES FERROMAGNETIQUES

I.1/ Introduction

Certains corps magnétiques n'acquièrent une aimantation qu'en présence d'un champ magnétique appliqué, tandis que d'autres non, comme les ferromagnétiques, possèdent une aimantation même en absence de champ magnétique appliqué. Celle-ci est connue sous le nom d'aimantation spontanée, elle provient du couplage entre les spins atomiques qui sont localisés sur les différents sites du réseau solide [1-2].

A très basse température, un système ferromagnétique est dans un état fondamental, où tout les spins sont parallèles entre eux et orientés dans un même sens (direction). Une agitation thermique suffit pour exciter ce système de spins. Les excitations élémentaires engendrées sont de nature ondulatoire, elles portent le nom d'ondes de spin. Ces oscillations proviennent de l'oscillation des orientations relatives des spins du réseau. Elles sont semblables aux ondes élastiques dans un cristal, qui proviennent des oscillations, relatives des positions des atomes dans le réseau [3-4].

Dans ce chapitre, nous présentons quelques notions de base concernant la dynamique des spins dans les solides ferromagnétiques ordonnés, ensuite nous exposons les différentes méthodes théoriques qui sont développées, ces dernières années, pour l'étude des systèmes ferromagnétiques désordonnés. Nous commençons par la description du formalisme général de la méthode de raccordement, que nous allons utiliser dans notre étude pour la détermination des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut, ainsi que l'étude de la diffusion d'ondes de spin dans des systèmes ferromagnétiques désordonnés de basses dimensions.

I.2/ Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques ordonnés

I.2.1/ Propriétés de symétrie

Du fait de la périodicité spatiale d'un réseau cristallin, deux atomes occupant deux sites équivalents du réseau effectuent les mêmes mouvements vibrationnels à une phase près. Les conditions aux limites périodiques, qui portent aussi le nom des conditions de Born Von Karman [5], permettent, par simple translation d'un cristal fini de N atomes, de modéliser la

dynamique vibrationnelle d'un cristal infini, et les ondes engendrées sont dites ondes élastiques.

Dans le cas des systèmes magnétiques, la dynamique précessionnelle des vecteurs de spin d'un système ferromagnétique/antiferromagnétique infini, est gouvernée par les conditions aux limites périodiques. En fait, celles-ci permettent par simple translation d'une maille élémentaire de spins de décrire la dynamique précessionnelle des vecteurs de spin d'un cristal magnétique infini, et les ondes engendrées sont dites ondes de spins.

I.2.2/ Equations de mouvement et matrice dynamique

Soit un système ferromagnétique composé de N spins excités par un mode précessionnel de fréquence angulaire ω . On note \vec{a} , \vec{b} et \vec{c} les trois vecteurs de base définissant la maille élémentaire du système considéré. Le vecteur position d'un nœud du réseau peut être défini par

$$\vec{r}(n,m,k) = n\vec{a} + m\vec{b} + k\vec{c} \quad (\text{I.1})$$

où (n, m, k) , sont des entiers naturels, peuvent être positifs, négatifs ou nuls.

Les excitations magnétiques d'un système de spins, sont décrites à partir d'un Hamiltonien H de type Heisenberg [6-8], décrivant toutes les interactions entre les vecteurs de spin des différents sites. Il est donné sous la forme suivante

$$H = -2 \sum_{p,p'} J(p,p') \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p'} \quad (\text{I.2})$$

- S_p et $S_{p'}$ sont deux vecteurs de spin situés sur les sites p et p' du réseau magnétique.
- $J(p,p')$ est un scalaire, positif dans le cas d'un réseau ferromagnétique. La théorie quantique le donne sous forme d'une intégrale appelée "intégrale d'échange". Sa valeur dépend des fonctions d'ondes électroniques des deux atomes et surtout de leur recouvrement. Notons bien que cette intégrale est très sensible à la distance entre les deux atomes : elle diminue très vite lorsque celle-ci augmente ; en pratique $J(p,p')$ est négligeable pour la paire d'atome (p,p') plus éloignée que premiers voisins [9-13].

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

Le mouvement de précession d'un vecteur de spin S_p situé sur un site p quelconque du réseau de spins est donné par l'équation de Landau-Lifshitz [14-18].

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = \gamma \vec{S}_p \times \vec{B}_p \quad (\text{I.3})$$

Où S_p est le vecteur intensité de spin d'un atome se trouvant sur le site p de coordonnées n , m et k , suivant les trois directions cartésiennes x , y et z , respectivement. Les nombres : n , m et k sont des entiers naturels positives, négatives ou nulles. γ est un rapport dit gyromagnétique, il est donné par la relation

$$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} \quad (\text{I.3a})$$

\vec{B}_p est un champ effectif régnant sur le site p . Celui-ci est donné par :

$$\vec{B}_p = \left(\frac{-2J}{g\mu_B} \right) (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}) \quad (\text{I.3b})$$

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = \vec{M}_p \otimes \vec{B}_p = -g\mu_B \vec{S}_p \otimes [\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}] \left(\frac{-2J}{g\mu_B} \right) \quad (\text{I.4a})$$

$$\frac{d\vec{S}_p}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [\vec{S}_p \otimes \vec{S}_{p-1} + \vec{S}_p \otimes \vec{S}_{p+1}] \quad (\text{I.4b})$$

En coordonnées cartésiennes, on aura :

$$\frac{dS_p^x}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [S_p^y (S_{p-1}^z + S_{p+1}^z) - S_p^z (S_{p-1}^y + S_{p+1}^y)] \quad (\text{I.5a})$$

$$\frac{dS_p^y}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [S_p^z (S_{p-1}^x + S_{p+1}^x) - S_p^x (S_{p-1}^z + S_{p+1}^z)] \quad (\text{I.5b})$$

$$\frac{dS_p^z}{dt} = \frac{2J}{\hbar} [S_p^x (S_{p-1}^y + S_{p+1}^y) - S_p^y (S_{p-1}^x + S_{p+1}^x)] \quad (\text{I.5c})$$

Si l'amplitude de l'excitation est faible ($S_p^x, S_p^y \ll S$), nous pouvons obtenir un système approché d'équations linéaires en prenant $S_p^z = S$.

Nous obtenons donc :

$$\frac{d S_p^x}{dt} = \frac{2JS}{\hbar} [2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y] \quad (\text{I.6a})$$

$$\frac{d S_p^y}{dt} = -\frac{2JS}{\hbar} [2S_p^x - S_{p-1}^x - S_{p+1}^x] \quad (\text{I.6b})$$

$$\frac{d S_p^z}{dt} = 0 \quad (\text{I.6c})$$

En introduisant la quantité :

$$S_p^+ = S_p^x + iS_p^y \quad (\text{I.7})$$

et en cherchant des solutions sous forme d'ondes planes, s'exprimant sous la forme :

$$S_p^+ = u(n, m, k) \cdot \exp(i\omega t) \quad (\text{I.8})$$

L'équation générale du mouvement de précession, d'un vecteur de spin sur un site p de coordonnées n, m et k , en absence de champ magnétique appliqué, est donnée sous la forme suivante [10-13,19-23] :

$$\omega u(n, m, k) = 2 \frac{J_A S_A}{\hbar} \left\{ \begin{aligned} &6 u(n, m, k) - [u(n-1, m, k) + u(n+1, m, k)] \\ &\quad - [u(n, m-1, k) + u(n, m+1, k)] \\ &\quad - [u(n, m, k-1) + u(n, m, k+1)] \end{aligned} \right\} \quad (\text{I.9})$$

où la quantité $u(n, m, k)$, représente l'amplitude de l'onde de spin [1,10-13].

L'équation du mouvement, (I.9), peut être écrite pour tous les N vecteurs de spins du système ferromagnétique considéré. Nous sommes alors en présence d'un système à N équations de mouvements qu'on ne peut pas résoudre. Par ailleurs, un système ferromagnétique infini composé d'une répétition périodique dans l'espace de Bloch, de cellules magnétiques

contenant ℓ spins, présente l'avantage de la symétrie de translation, qui avec les conditions aux limites périodiques, permet de réduire le champ de précession des vecteurs de spin.

En effet, du fait de la périodicité spatial du réseau cristallin, deux vecteurs de spin S_p et $S_{p'}$ occupant deux sites équivalents du réseau magnétique, effectuent à une phase près les mêmes mouvements de précessions. Par conséquent, leurs amplitudes de précession vérifient à chaque instant t , la relation suivante [19] :

$$\vec{u}(p', \omega) = \vec{u}(p, \omega) \cdot \exp^{i\vec{q} \cdot \vec{r}(p, p')} \quad (\text{I.10})$$

Où \vec{q} est un vecteur d'onde du réseau réciproque du cristal, et $\vec{r}(p, p')$ est un vecteur joignant la position d'équilibre du spin p à celle du spin p' .

La relation (I.10) permet alors de réduire le système d'équation (I.9) contenant N équations à un système à ℓ équations homogènes à ℓ inconnues, qu'on peut mettre sous la forme matricielle suivante

$$[\omega I - M_d(\vec{q})] |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{I.11})$$

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

Pour que le système d'équation (I.11) ait des solutions en ω non triviales, il faut que le déterminant soit nul, c'est-à-dire :

$$\det[\omega I - M_d(\vec{q})] = 0 \quad (\text{I.12})$$

Ainsi grâce à cette condition de compatibilité qui fournit une équation algébrique en ω , on peut déterminer les différents modes de précessions du système magnétique, qui sont caractérisés par les ℓ solutions ω_s , avec $s = 1, 2, 3, \dots, \ell$ et $\omega_s > 0$, [4-7].

I.3/ Dynamique des spins dans les systèmes ferromagnétiques désordonnés

I.3.1/ Rappel

Le formalisme précédant est basé sur les conditions aux limites, il s'applique uniquement à des systèmes périodiques infinis. Or, dans le cas des systèmes magnétiques désordonnés, l'absence de symétrie de translation dans une direction donnée rend impossible l'application de ces conditions. Autrement dit le théorème de Bloch n'est pas applicable suivant cette direction. D'où la nécessité d'utiliser de nouvelles formulations théoriques afin de réaliser un couplage entre les équations du mouvement d'une couche atomique à l'autre. Ces formulations permettent, soit de résoudre des systèmes infinis d'équations, soit de limiter, dans une approximation valable, le nombre d'équations et le nombre d'inconnues [24]. A l'heure actuelle, plusieurs méthodes ont été élaborées et adaptées à l'étude des systèmes magnétiques désordonnés pour calculer les états de magnons localisés, ainsi que pour l'étude du phénomène de diffusion d'ondes de spin. Parmi celles-ci, on peut citer :

I.3.1.a/ La méthode de diagonalisation direct (ou Slab method)

Cette méthode a été introduite par Clark en 1965, sa première application sur un système physique a été réalisée par Allen et *al* [10,25-26], pour l'étude des états vibrationnels de surface afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système. Le nombre de plans utilisés pour la modélisation est suffisamment grand. Cette méthode consiste à modéliser les systèmes magnétiques par un nombre fini de plans atomique de structure périodique donnant lieu à deux surfaces limitées. A partir de la résolution numérique de la matrice dynamique décrivant les équations linéaires liant les amplitudes des ondes de spins, on peut accéder au calcul des courbes de dispersions des magnons de surface. Elle permet aussi de déterminer les densités spectrales, et les vecteurs déplacements des atomes. Néanmoins, cette méthode présente le désavantage d'utiliser des matrices de taille importante qui augmente les temps de calcul lors des simulations numériques.

I.3.1.b/La méthode des fonctions de Green

Développée par Lifhitz et Rosenzweig en 1948, [25-26], elle consiste à créer un réseau semi-fini à partir d'un réseau illimité par la bisection des plans atomiques consécutifs dans un cristal infini en annulant les interactions entre spins situés de part et d'autre d'un plan. Cette modification est interprétée comme une perturbation agissant sur la matrice dynamique du système magnétique en la transformant en deux matrices.

$$M_{\text{Syst}} = M_v + M_P \quad (\text{I.13})$$

M_v : représente la matrice de volume.

M_P : représente la matrice de perturbation qui est composée d'une sous matrice non nulle dont l'ordre fini dépend du nombre de plans atomiques.

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

$$G(\omega) = [\omega I - M_d]^{-1} \quad (\text{I.14})$$

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

$$\begin{aligned} G_S(\omega) &= [\omega I - (M_d + M_P)]^{-1} \\ \Rightarrow G_S(\omega) &= \left[(\omega I - M_d) \cdot \left(I - \frac{M_P}{\omega I - M_d} \right) \right]^{-1} \\ \Rightarrow G_S(\omega) &= [(\omega I - M_d) \cdot \{I - G(\omega) \cdot M_P\}]^{-1} \end{aligned}$$

d'où la relation matricielle suivante:

$$G_S(\omega) = [I - G(\omega) \cdot M_P]^{-1} G(\omega) \quad (\text{I.15})$$

L'ensemble des états de précessions du système perturbé est alors donné par les pôles de la fonction $G_S(\omega)$. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par la présence d'une surface libre sur les spectres de précession des spins [10,13].

I.3.1.c/La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchtwang [27] en 1967 pour étudier l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin à trois dimensions avec une limite qui est la surface. Elle a été reprise en 1987 par J. Szeftel et A. Khater dans deux articles [28-30], le premier est un développement du formalisme mathématique et le second une application directe aux surface Ni(100) et Ni(100)+C(2x2).

En 1994, la méthode a été appliquée et adaptée par M. Tamine, dans son travail de thèse sous la direction scientifique du professeur A. Khater, à l'étude des modes des magnons en surface d'une structure antiferromagnétique à deux sous réseau frustrés [31-32].

La méthode de raccordement a été ensuite reprise et développée pour l'étude des ondes de spin au voisinage des défauts par certains auteurs, plus particulièrement on peut citer les travaux de M. G. Cottam, A. Khater, Abou. Ghantous. Le formalisme général décrivant le principe de la méthode est donné aux paragraphes suivants. C'est cette méthode qu'on va utiliser dans ce travail de mémoire.

En arrivant sur la zone de défaut, une onde incidente (OI) venant de la gauche d'une inhomogénéité vers la droite, se sépare en deux parties : une transmise qu'on note par \vec{u}_t , et une autre réfléchie qu'on note par \vec{u}_r , voir Figure (I.1).

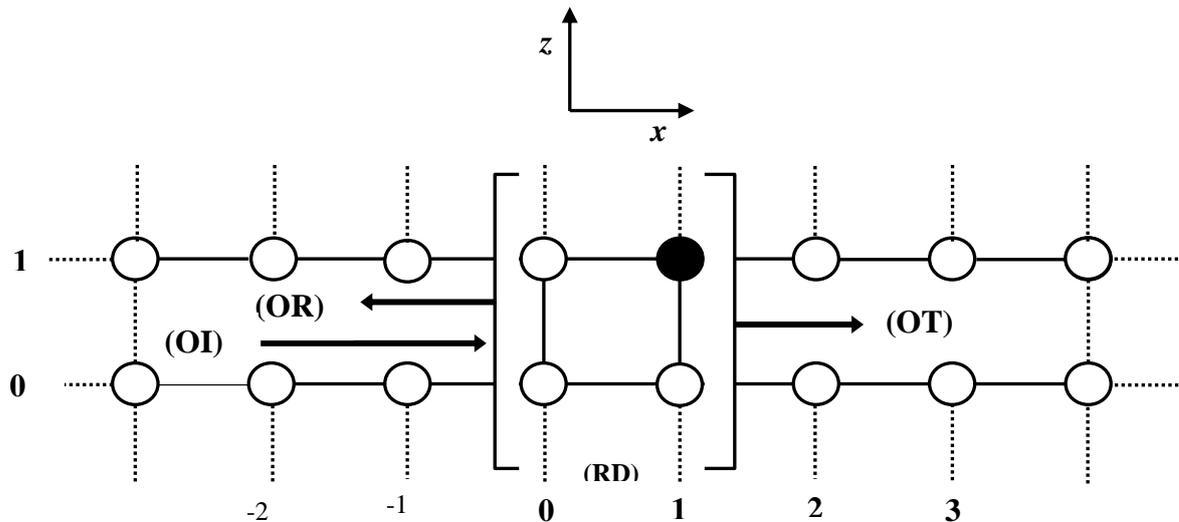


Figure (I.1) : Représentation d'une onde de spin diffusée par un défaut magnétique. Visualisation des ondes résultantes: onde réfléchie (OR) et transmise (OT).

Les deux ondes, réfléchie et transmise, sont développées sous forme d'une combinaison linéaire des probabilités de transmission $T_{\nu\bar{\nu}}$ et des probabilités de réflexion $R_{\nu\bar{\nu}}$, définissant deux espaces finis, sur la base des modes propres du système[13].

I.4/ Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut magnétique

I.4.1/ Principe de la méthode

La méthode de raccordement est analytique, elle consiste à décrire les relations entre les mouvements des amplitudes de précession des spins, situés sur les sites atomiques

d'un système infini, par un nombre fini d'équations [33-42]. Son application exige que l'espace du solide (système) soit divisé en trois régions. Comme l'indique la figure(I.2).

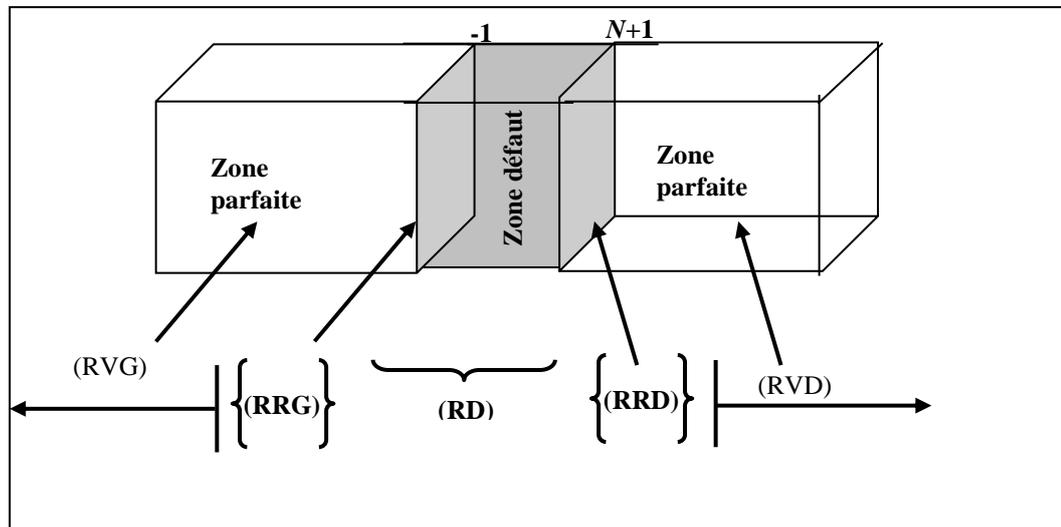


Figure (I.2) : Représentation schématique d'une zone magnétique perturbée couplant différentes zones semi-infinies parfaites composé de quatre chaînes atomiques disposés parallèlement deux à deux selon le concept introduit par la méthode de raccordement ; visualisation des régions : de défaut (RD), de raccordement {(RRG) et (RRD)} et de volume {(RVG) et (RVD)}.

- Régions parfaites (volume) (RVG et RVD) : c'est la région (à gauche ou à droite), où on retrouve le volume les spins ne sont pas influencés par la présence du défaut, elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle et c'est-elle qui permet de tracer les courbes de dispersion en volume.
- Région de défaut (RD) : c'est la région qui renferme tous types de nanostructures et de défauts, elle est généralement affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques contenant les spins, d'où la perte de la périodicité du réseau.
- Région de raccordement (RRG et RRD): est une région intermédiaire (à gauche ou à droite), entre la région parfaite et la région de défaut. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut aux états de magnon évanescents de la zone parfaite [10].

I.4.2/ Formulation du problème

Compte tenu de la brisure de symétrie, due à la présence d'un défaut de structure, la relation qui relie les amplitudes de précession des vecteurs de spin dans la direction cartésienne α ,

entre d'une part un vecteur de spin p appartenant à un plan l et d'autre part un vecteur spin p' appartenant à un autre plan l' , tous deux parallèle au défaut mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

$$u_\alpha(p', l', \omega) = u_\alpha(p, l, \omega) \cdot Z^{(l'-l)} \exp^{i\vec{q} \cdot \vec{r}(p, p')} \quad (\text{I.16})$$

Où Z est un facteur de phase, tel que $|Z| \leq 1$. q étant un vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin, et α caractérise l'une des trois directions cartésiennes x , y ou z .

En insérant l'équation (I.16) dans les équations de mouvements (I.9), on obtient un système d'équations pour les amplitudes de précessions $|u\rangle = |u_\alpha(p, \omega)\rangle$ des vecteurs de spin d'une maille élémentaire dans la zone dite volume, qui peuvent s'écrire analytiquement:

$$\omega u(n, s, m) = 2 \frac{J_A S_A}{\hbar} \left\{ \begin{aligned} &6 u(n, s, m) - [u(n-1, s, m) + u(n+1, s, m)] \\ &\quad - [u(n, s-1, m) + u(n, s+1, m)] \\ &\quad - [u(n, s, m-1) + u(n, s, m+1)] \end{aligned} \right\} \quad (\text{I.17})$$

Ou sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega I - D(\vec{q}, Z)] \cdot |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{I.18})$$

La condition de compatibilité de ce système donne accès pour chaque donnée (q, ω) à une équation polynomiale en Z dont les solutions caractérisent les différents modes de précessions des zones magnétiques parfaites. Les solutions telles que $|Z|=1$, sont des modes itinérants, et celles vérifiant la condition $|Z|<1$, correspondent à des modes évanescents.

La détermination des états de magnons localisés au voisinage du défaut magnétique, commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine (q, ω) . Puis, nous déterminons les équations de mouvements de précessions (I.9) des vecteurs de spin représentatif des trois régions définis auparavant. Ceci conduit naturellement à un système matriciel M_d d'équations rectangulaire ayant le nombre d'équations plus petit que le nombre d'amplitudes de précessions inconnues [13,44].

Afin de pouvoir résoudre un tel système, on peut réduire le nombre de variables pour en avoir un système d'équations homogène facile à résoudre. Ainsi, pour cela, on décrit pour chaque donnée (q, ω) les amplitudes de précession des vecteurs de spin par des ondes évanescents

exprimées comme une combinaison linéaire sur les ℓ modes de précessions en zone parfaite, suivant la direction normale au défaut magnétique. Ces ℓ modes correspondent au ℓ racines Z satisfaisant la condition $|Z| < 1$, provenant de l'étude dynamique des zones parfaites. La relation suivante fait état de ce raccordement [45]

$$u_{\alpha}(p, \omega) = \sum_{\nu=1}^{\ell} Z_{\nu}^{(n-n_i)} \cdot R_{\nu} \cdot A(\alpha, \nu) \quad (\text{I.19})$$

dans laquelle :

- n est la première coordonnée du vecteur spin p considéré, avec $n \geq n_i$ où n_i représente la coordonnée du premier plan atomique à l'interface suivant la direction α .
- α parcourt les trois directions cartésiennes x, y et z .
- ℓ est le nombre de modes évanescents, déterminés dans l'étude des zones parfaites.
- R_{ν} est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent ν dans la base $\{\mathbf{R}\}$.
- Z_{ν} est le facteur de phase du mode évanescent ν de la matrice dynamique dans le volume.
- $A(\alpha, \nu)$ représente le poids pondéré associé à la contribution du ν -ème mode évanescent dans la direction cartésienne α , [46].

La connaissance simultanée des facteurs de phases Z_{ν} caractérisant les modes évanescents, ainsi que des vecteurs propres correspondants, tous deux issus de l'étude dynamique des zones parfaites, permet de définir la matrice de raccordement M_R à l'aide des développements (I.19). Le produit des deux matrices M_d et M_R ainsi définies, conduit à une matrice carrée M_S , caractérisant un système d'équations homogènes pour lequel des solutions non triviales sont admises.

$$\det[\omega I - M_S(\vec{q}, Z)] = 0 \quad (\text{I.20})$$

Cette dernière relation permettra l'accès aux modes de magnons localisés au voisinage d'une zone magnétique perturbée. Ainsi, il est alors possible de calculer les courbes de dispersions, les densités spectrales et les densités d'états associées aux différents modes localisés au voisinage du défaut considéré.

Références

- [1] R. Chadli, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de T. Ouzou (2004)
- [2] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, and R. Chadli, *Eur. Phys. J. B* 82, 53 (2011)
- [3] C. Kittel, *Introduction à la physique de l'état solide*, Dunod Ed., 5^{ème} édition (1995)
- [4] O. Nafa, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de T. Ouzou (2010)
- [5] M. Born and T. Von Karman, *Z. Physik* 13, 297 (1912)
- [6] Niu-Niu Chen and M. G. Cottam *Phys. Rev. B* 44, 14 (1991)
- [7] H. Puzkarski. *Phys. stat. Solid. (b)*. 171, 205 (1992)
- [8] Niu-Niu Chen and M. G. Cottam *J. Appl. Phys.* 67, 9 (1990)
- [9] B. Bourahla, O. Nafa, R. Tigrine, *Physica B*, 406, 725 (2011)
- [10] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2007)
- [11] S. Irene, Mémoire de Magister, Université de M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [12] R. L. Stamps and R. E. Camley, R. J. Hicken. *Phys. Rev. B* 54, 6 (1996)
- [13] Shan-Ho Tsai and D. P. Landau. *Cond-Mat / 0302397 v1* (2003)
- [14] Svetlana V. Rakhmanova and Andrei V. Shchegrov. *Phys. Rev. B* 57, 22 (1998)
- [15] S. Flach and Y. Zolotaryuk. *Solid state Phys.* 41, 315 (2001)
- [16] R. L. Stamps and R. E. Camley. R. J. Hicken. *J. Appl. Phys.* 81, 8 (1997)
- [17] K. M. Schep, J. B. A. N. Van Hoof, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, J. E. Inglesfield. *J. Mag. Mag. Mat.* 177-181, 1166 (1998)
- [18] M. Abou. Ghantous and A. Khater. *Eur. Phys. J. B* 12, 335 (1999)
- [19] R. L. Stamps, R. E. Camley, B. Hillebrands, G. Güntherodt, *Phys. Rev. B* 46, 17 (1992)
- [20] M. Belhadi, A. Khater, *Surf. Rev. Let.* 11, 99 (2004)
- [21] S. Flach and Y. Zolotaryuk. *Solid state Phys.* 41, 315 (2001)
- [22] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, ed. V. M. Agronovich and R. Loudon (Amsterdam: North Holland) (1984)
- [23] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [24] Thèse de doctorat de O. Rafil, Université du Maine, France (1993)
- [25] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev.* 155, 731 (1967)
- [26] J. Szeftel et A. Khater, *J. Phys. C: Solid state* 20, 4725 (1987)
- [27] J. Szeftel. A. Khater, F. Mila, S. D'addatoet N. Auby, *J. Phys. C: Solid State Phys* 21, 2113 (1988)
- [28] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 20, 4725 (1987)
- [29] Thèse de doctorat de M. Tamine, Université de Maine, France (1994)
- [30] R. Lai, S. A. Kiselev, and A. J. Sievers, *Phys. Rev. B* 56, 9 (1997)
- [31] P. Böni, B. Roessli, D. Görlitz and J. Kötzler, *Phys. Rev. B* 65, 144434 (2002)
- [32] B. Bourahla, O. Nafa and R. Tigrine, *Physica E*, 43, 1213 (2011)
- [33] Y. Pennec, A. Khater, *Surf. Sci.* 348, 82 (1995)
- [34] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec, K. Maschke, *J. Phys. Cond. Matter.* 8, 7589 (1996)
- [35] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, 1707 (1997)
- [36] A. A. Maradudin, R. E. Wallis et L. Dobrzynski, *Hand Book of surfaces and interfaces*, Garland, New York, Vol 3 (1980)
- [37] Hyunbum Jang and Malcolm J. Grimsom. *J. Phys. Condens. Matter* 10, 9641 (1998)
- [38] L. Udvardi, L. Szunyogh, K. Palotas and P. Weinberger. *Phys. Rev. B* 68, 104436 (2003)

Chapitre II

DYNAMIQUE DES SPINS D'UN GUIDE D'ONDE PARFAIT AYANT UNE FORME TUBULAIRE

II.1/ Introduction

Les études concernant le phénomène de localisation d'ondes de spin, dans des systèmes magnétiques ordonnés, ont été mises en évidence par analogie aux études faites sur les phonons. Le formalisme décrivant ce phénomène a été traité de manière générale ; plus particulièrement, on peut citer les travaux de Wallis et Maradudin effectués en 1967[1-3]. Après deux ans, le problème d'états de magnons localisés a été repris par R. E. De Wames et T. Wolfram. Ils ont calculé les états de magnons localisés de quelques structures simples [4-7].

Un travail remarquable a été enregistré après les années 80 pour l'étude des états de magnons localisés dans les systèmes magnétiques ordonnés, [8-11]. Le progrès signalé dans ce domaine de recherche est dû essentiellement à l'apparition de nouveaux concepts théoriques, suite au développement expérimental, ainsi qu'à la puissance accrue des ordinateurs permettant des simulations sans cesse et plus élaborées.

Grâce à la miniaturisation des composants électroniques incorporant des matériaux magnétiques, l'étude du comportement d'objets magnétiques mésoscopiques (10 nm à 1 μ m) est devenue un domaine de recherche en plein développement, [12-14] et un besoin impératif. En effet, des modifications de propriétés magnétiques sont normalement attendues lorsque les dimensions latérales des objets deviennent de l'ordre de grandeur des paramètres intrinsèques qui sont la taille des domaines magnétiques (0,1 à 10 μ m), la longueur de diffusion de spin (10 à 200 nm) ou la largeur de paroi (10 nm). Les propriétés d'un système mésoscopique diffèrent réellement des propriétés du solide massif, et quelles sont alors les modifications apportées par la réduction de la taille du système massif ?

Dans ce chapitre l'objectif principal est d'étudier la dynamique magnétique d'un système ferromagnétique à forme tubulaire quasi-unidimensionnel. Pour cela nous avons adapté la méthode de raccordement, rappelée au chapitre précédent. Un calcul d'états de magnons

localisés ainsi que de densités d'états des spins formants le défaut a été fait, et ce pour mettre en évidence les effets de certains défauts sur la propagation d'ondes de spin [5-6].

II.2/ Présentation du modèle

Nous nous intéressons à l'étude de la diffusion d'ondes de spin dans une structure tubulaire quasi-1D ayant des spins orientés dans une seule direction (arrangement ferromagnétique).

Notre étude se limite aux interactions entre premiers voisins [6, 15].

La figure (II.1), ci-dessous, illustre un schéma représentatif du système modèle que nous avons choisi pour étudier la dynamique magnétique d'un système tubulaire ferromagnétique, formé de quatre chaînes de spins à configuration 3D et parallèles deux à deux.

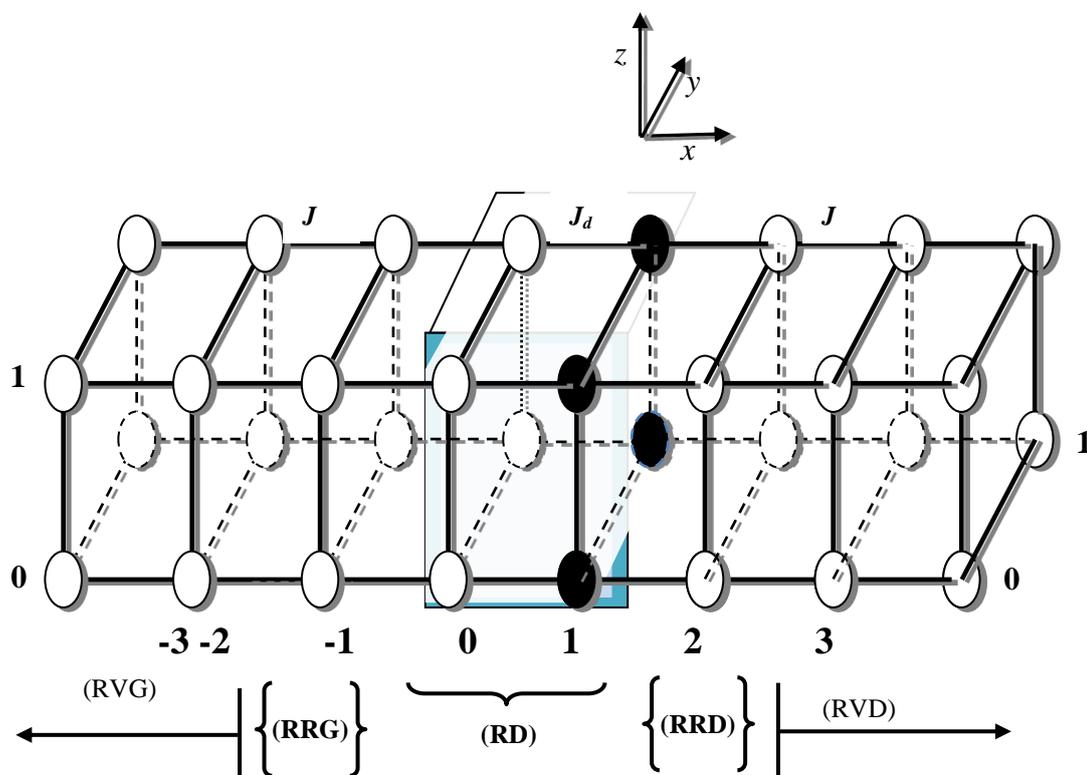


Figure (II.1) : Représentation schématique d'une interface magnétique couplant deux semi-infinis Heisenberg ferromagnétiques structures tubulaires composé de quatre chaînes atomiques disposées parallèlement deux à deux selon le concept introduit par la méthode de raccordement ; visualisation des régions : de défaut (RD), de raccordement {RRG} et {RRD} et de volume {(RVG)et(RVD)}.

Tout d'abord nous avons attribué à chaque atome situé sur un site p un vecteur de spin S_p où $p \equiv (n, m, k)$, de composantes S_p^x , S_p^y et S_p^z . Les indices (n, m, k) , sont des nombres entiers donnant la position du spin le long des trois directions cartésiennes x , y et z , respectivement. L'axe z et la composante S_p^z sont perpendiculaires à la structure tubulaire, l'axe y est parallèle

à l'interface magnétique. Quand à l'axe x , il est normal à cette dernière. A cause du défaut magnétique, la symétrie de translation se trouve brisée le long des axes x et y .

Notre étude est réalisée dans un cadre simple, où nous n'avons pas tenu compte de certains paramètres physiques (champ magnétique extérieur et champ d'anisotropie). Cela dans le but de simplifier les formulations mathématiques du problème ainsi que pour mieux contrôler les différents paramètres du système qui interviennent dans le calcul des équations du mouvement de précession des spins [5-7].

L'interaction d'échange entre les spins est perturbée par la présence de l'interface magnétique, nous avons alors introduit un paramètre d'échange suivant :

- J : interaction d'échange entre les spins appartenant à la région parfaite dite de volume.
- Nous avons aussi noté les quantums de spins par S .

Ainsi qu'une énergie normalisée Ω donnée par :

$$\Omega = \hbar\omega / 2 J S \quad (\text{II.1})$$

II.3/ Dynamique des spins dans les régions de volumes loin du défaut

II.3.1 / Equations de mouvement

II.3.1 .1/ Ecriture des équations

Pour avoir l'équation de mouvement d'un vecteur de spin S_p , situé sur un site d'indice p , appartenant à la région parfaite, on utilise la formule (I.9) présentée dans le chapitre précédent. La quantité $u(n,m,k)$, représente l'amplitude de précession d'un vecteur de spin appartenant à la région de volume [3, 5-7].

Spin du site (n,m,k) :

$$\omega u(n,m,k) = 2 \frac{J S}{\hbar} \{ 4 u(n,m,k) - [u(n-1,m,k) + u(n+1,m,k)] - [u(n,m,k+1) + u(n,m+1,k+1)] \} \quad (\text{II.2a})$$

Spin du site $(n,m+1,k)$:

$$\omega u(n, m+1, k) = 2 \frac{J S}{\hbar} \{4 u(n, m+1, k) - [u(n-1, m+1, k) + u(n+1, m+1, k)] - [u(n, m+1, k+1) + u(n, m, k)]\} \quad (\text{II.2b})$$

Spin du site $(n, m+1, k+1)$:

$$\omega u(n, m+1, k+1) = 2 \frac{J S}{\hbar} \{4 u(n, m+1, k+1) - [u(n-1, m+1, k+1) + u(n+1, m+1, k+1)] - [u(n, m, k+1) + u(n, m+1, k)]\} \quad (\text{II.2c})$$

Spin du site $(n, m, k+1)$:

$$\omega u(n, m, k+1) = 2 \frac{J S}{\hbar} \{4 u(n, m, k+1) - [u(n-1, m, k+1) + u(n+1, m, k+1)] - [u(n, m+1, k+1) + u(n, m, k)]\} \quad (\text{II.2d})$$

En utilisant les notations introduites au début de ce chapitre, les équations (II.1) et (I.9), donnant le mouvement de précession d'un vecteur de spin sur un site de coordonnées (n, m, k) peuvent se réécrire par :

Spin du site (n, m, k) :

$$\Omega u(n, m, k) = 4 u(n, m, k) - u(n-1, m, k) - u(n+1, m, k) - u(n, m, k+1) - u(n, m+1, k+1) \quad (\text{II.3a})$$

Spin du site $(n, m+1, k)$:

$$\Omega u(n, m+1, k) = 4 u(n, m+1, k) - u(n-1, m+1, k) - u(n+1, m+1, k) - u(n, m+1, k+1) - u(n, m, k) \quad (\text{II.3b})$$

Spin du site $(n, m, k+1)$:

$$\Omega u(n, m, k+1) = 4 u(n, m, k+1) - u(n-1, m, k+1) - u(n+1, m, k+1) - u(n, m+1, k+1) - u(n, m, k) \quad (\text{II.3c})$$

Spin du site $(n, m+1, k+1)$:

$$\Omega u(n, m+1, k+1) = 4 u(n, m+1, k+1) - u(n-1, m+1, k+1) - u(n+1, m+1, k+1) - u(n, m, k+1) - u(n, m+1, k) \quad (\text{II.3d})$$

II.3.1.2/ Relation de dispersion

En faisant intervenir les facteurs de phases le long des axes x et y , qui sont donnés par les relations suivantes :

$$u(n+1, m, k) = Z \cdot u(n, m, k) \quad (\text{II.4a})$$

$$u(n-1, m, k) = \frac{1}{Z} u(n, m, k) \quad (\text{II.4b})$$

Où :

$$Z = \exp^{iq_y a} ; \varphi_y = q_y a \quad (\text{II.5})$$

En tenant compte de ces nouvelles notations, les équations (II.4) et (II.5) prendront la forme suivante :

Spin du site (n, m, k) :

$$\Omega u(n, m, k) = \left\{ 4 - \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \right\} \cdot u(n, m, k) - u(n, m, k+1) - u(n, m+1, k+1) \quad (\text{II.6a})$$

Spin du site $(n, m+1, k)$:

$$\Omega u(m, n+1, k) = -u(m, n, k) + \left\{ 4 - \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \right\} \cdot u(m, n+1, k) - u(m, n+1, k+1) \quad (\text{II.6b})$$

Spin du site $(n, m, k+1)$:

$$\Omega u(n, m, k+1) = -u(n, m, k) + \left\{ 4 - \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \right\} \cdot u(n, m, k+1) - u(n, m+1, k+1) \quad (\text{II.6c})$$

Spin du site $(n, m+1, k+1)$:

$$\Omega u(n, m+1, k+1) = -u(n, m, k+1) + \left\{ 4 - \left(Z + \frac{1}{Z} \right) \right\} \cdot u(n, m+1, k+1) - u(n, m+1, k) \quad (\text{II.6d})$$

Ces quatre équations, peuvent être réécrites sous forme d'une matrice dynamique du système de dimension $M_d(4 \times 4)$ comme suit :

$$[M_d] = \begin{bmatrix} \Omega-4+Z+1/Z & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \Omega-4+Z+1/Z & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \Omega-4+Z+1/Z & 1 \\ 0 & 1 & 1 & \Omega-4+Z+1/Z \end{bmatrix} |u\rangle = 0 \quad (\text{II.7})$$

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u(n, m, k) \\ u(n, m+1, k) \\ u(n, m, k+1) \\ u(n, m+1, k+1) \end{pmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Les courbes de dispersion du système étudié sont données par :

$$[\Omega I - M_d\{Z, \phi_y\}] \cdot |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{II.9})$$

Ici I : est une matrice identité

M_d : est appelée matrice dynamique du système tubulaire parfait, composé de 4 chaînes parallèles disposées dans l'espace deux à deux.

$$[M_d] = \begin{bmatrix} \Omega-4+Z+1/Z & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \Omega-4+Z+1/Z & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \Omega-4+Z+1/Z & 1 \\ 0 & 1 & 1 & \Omega-4+Z+1/Z \end{bmatrix} |u\rangle = 0$$

La matrice peut se mettre sous la forme $[M_d]$

$$\begin{bmatrix} e & 1 & 1 & 0 \\ 1 & e & 0 & 1 \\ 1 & 0 & e & 1 \\ 0 & 1 & 1 & e \end{bmatrix}$$

Avec : $e = \Omega - 4 + \left\{Z + \frac{1}{Z}\right\}$.

II.4/ Courbe de dispersion

On fixe ϕ_y , la résolution du problème aux valeurs propres des matrices dynamiques en volume : M_d donne quatre modes propres Ω_v , ainsi que leurs vecteurs propres correspondants.

Lorsque le facteur de phase Z parcourt le cercle unité dans le plan complexe, ou autrement dit lorsque le vecteur d'onde q parcourt la première zone de Brillouin $[-\pi, \pi]$, on obtient les relations de dispersion pour les différents modes propres.

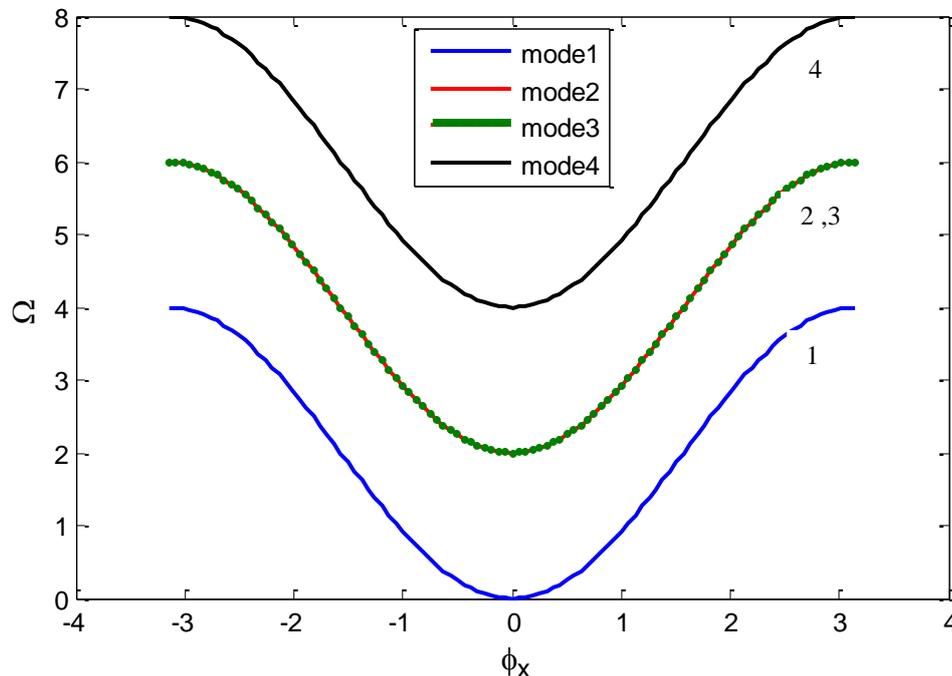


Figure (II.2) : Courbes de dispersion des magnons d'une structure tubulaire formée de quatre chaînes à configuration 3D, parallèle deux à deux, où chaque site est doté d'un spin couplé ferromagnétiquement avec ses voisins.

II.5/ discussions des résultats

Sur la figure (II.2), nous avons présenté les courbes de dispersion du guide d'ondes parfait dans la première zone de Brillouin. Les modes nommés $i \in \{1, 2, 3, 4\}$, sont classés du bas vers le haut respectivement, se propagent dans les intervalles de fréquences :

$$\text{mode 1 : } \Omega_1 = [0, \Omega_{1\max} = 4], \text{ mode 2 : } \Omega_2 = [2, \Omega_{2\max} = 6],$$

$$\text{mode 3 : } \Omega_3 = [2, \Omega_{3\max} = 6], \text{ mode 4 : } \Omega_4 = [4, \Omega_{4\max} = 8].$$

Chacun de ces modes du guide d'ondes parfait, composé de quatre chaînes à disposition 3D et parallèles deux à deux, est soit symétrique ou antisymétrique par rapport à l'axe passant par le centre de la structure tubulaire suivant la direction (Ox).

Les branches des relations de dispersion peuvent être classées en deux types en fonction de leur comportement au voisinage de $\phi_x = 0$; il y a celles dont l'énergie tend vers zéro, et les autres. Nous les appellerons respectivement branches acoustiques et branches optiques, ces résultats sont conformes aux résultats trouvés dans plusieurs travaux de thèse [5-7,16-18].

II.6 / Vitesses de groupe

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

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \text{ Soit } \vec{V}_g = \overrightarrow{\text{grad}}_q \Omega(\vec{q}) \quad (\text{II.10})$$

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

Pour déterminer cette vitesse, deux méthodes peuvent être utilisées : la première emploie la méthode des différences finies et la seconde emploie la méthode des perturbations. L'essentiel de ces deux méthodes peut être consulté, par exemple, dans la référence [19]. Le principe de calcul de la vitesse est donné en annexe A.

Dans nos calculs, nous opterons plutôt pour la deuxième méthode qui est basée sur la théorie standard des perturbations utilisée également en mécanique quantique. Nous avons choisi cette méthode car elle est plus précise que la première par ce qu'elle comporte une étape analytique en plus. Cette méthode requiert néanmoins quelques calculs supplémentaires. La forme explicite de la vitesse de groupe donnée par cette méthode est donnée par [5-7,15]:

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} = -\vec{u}^t \frac{\partial M_d}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II.11})$$

$$\left[\frac{\partial M_d}{\partial q} \right] = \mathbf{i} \begin{bmatrix} Z-1/Z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Z-1/Z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Z-1/Z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z-1/Z \end{bmatrix} \quad (\text{II.12})$$

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.

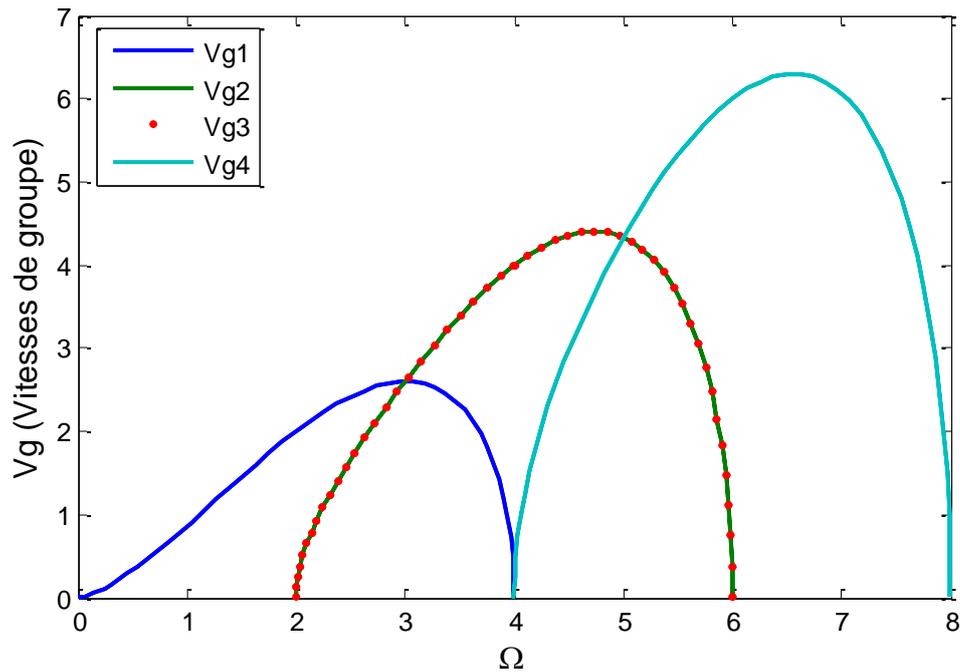


Figure (II.3): Vitesses de groupe de la structure tubulaire quai-1D dans les quatre modes de précession du guide d'ondes parfait en fonction de la fréquence Ω .

La figure (II.3), donne l'allure des vitesses de groupe V_g pour les différents modes propres en fonction de l'énergie de diffusion Ω du guide d'ondes parfait. Nous constatons sur cette figure que les courbes de vitesses des différents modes évoluent globalement avec la même allure. Ces courbes montrent aussi des zones où les vitesses de groupe des différents modes se recouvrent. Cela signifie que les modes peuvent être excités simultanément dans ces intervalles de fréquences.

II.7/ Modes atténués

Lors de l'étude du phénomène de diffusion, il faut considérer non seulement les modes propageant mais également les modes évanescents. Pour une valeur donnée de Ω , on doit prendre toute les solutions telles que : $|Z(i)| \leq 1$.

L'évolution des facteurs de phases Z_v en fonction de la fréquence Ω , est obtenue par la méthode de l'augmentation de la base [18]. Cette dernière permet de linéariser le système de départ en introduisant de nouvelles variables.

$$\vec{v}_{i\alpha} = -\frac{1}{Z} \vec{u}_{i\alpha} \quad (\text{II.13})$$

Nous obtenons un système d'équations linéaires sous forme d'un problème aux valeurs propres en Z .

$$C_1(\Omega).\vec{W} = Z.C_2.\vec{W} \quad (\text{II.14})$$

Où C_1 et C_2 sont deux matrices extraites de M_d de taille $(8 \otimes 8)$.

Tandis que \vec{W} est un vecteur défini par :

$$\vec{W} = \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \end{pmatrix} \quad (\text{II.15})$$

(Le calcul, des formes explicites des matrices extraites de la matrice dynamique, est donné en annexe B).

Les deux matrices C_1 et C_2 sont obtenues en remplaçant dans les équations de mouvement, les quantités $\{\frac{\vec{u}_1}{Z}, \frac{\vec{u}_2}{Z}\}$ par les nouveaux vecteurs $\{\vec{v}_3, \vec{v}_4\}$, respectivement. Par suite, nous réécrivons chaque équation sous la forme (II.13), puis par identification, nous arrivons aux formes explicites des matrices C_1 et C_2 .

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

$$|Z_v| \leq 1 \quad (\text{II.16})$$

Les résultats que nous avons obtenus sont conformes aux résultats des travaux antérieurs cités dans les références [3, 5-6, 15].

Références

- [1] I. P. Ipatova, A. A. Klochikhin, A. A. Maradudin, R. F. Wallis, “*Proceeding of the Conference on Localized Excitations*”. New York (1968)
- [2] R. F. Wallis, A. A. Maradudin, *Solid State Com.*5, 89 (1967)
- [3] S. Amoudache, Mémoire de Magister, USTHB – Bab-Ezouar (2005)
- [4] R. E. De Wames and T. Wolfram. *Phys. Rev.* 185, 2 (1969)
- [5] R. Chadli, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004)
- [6] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2007)
- [7] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [8] M. Abou. Ghantous and A. Khater. *Eur. Phys. J. B* 12, 335 (1999)
- [9] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam, *Solid. State. Com.*76, 437(1990)
- [10] Niu-Niu Chen and M. G. Cottam, *Phys. Rev. B* 44, 14 (1991)
- [11] H. Puzkarski. *Phys. Stat. Solid. (b)* 171, 205 (1992)
- [12] K. M. Schep, J. B. A. N. Van Hoof, P. J. Kelly, G. E. W. Bauer, J. E. Inglesfield, *J. Mag. Mat.* 177-181, 1166 (1998)
- [13] B. A. Ivanov, V. M. Muravyov, D. D. Sheka, *J. Exp. Theo. Phys.*89, 58 (1999)
- [14] R. L. Stamps, R. E. Camley, B.Hillebrands, and G. Güntherodt, *Phys. Rev. B* 46, 17 (1992)
- [15] B. Lazarovits, L. Szunyogh, and P. Weinberger. *Phys. Rev. B* 67, 024415(2003)
- [16] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [17] M. Belhadi, Thèse de doctorat d’état, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2000)
- [18] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, and R. Chadli, *Eur. Phys. J. B* 82, 53 (2011)
- [19] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, *Mod. Phys.Lett. B*19, 625 (2005)

Chapitre III

EXCITATIONS MAGNETIQUES DANS LES SYSTEMES TUBULAIRES PERTURBES

Introduction

Les études concernant les systèmes de basses dimensions constituent un domaine de recherche en pleine expansion sur le double plan théorique et expérimental. De nombreux chercheurs s'investissent davantage dans ce domaine. Il y a essentiellement deux motivations principales pour l'intérêt accordé à ces systèmes mésoscopique désordonnés, la première est leurs applications de plus en plus croissantes comme composants dans la technologie de pointe : la micro-électronique, l'aéronautique et l'optoélectronique ; et la seconde est le développement des formalismes appropriés.

Actuellement, pour décrire l'impact des défauts de structure sur les propriétés de localisation et de diffusion, plusieurs méthodes sont théoriques et expérimentales sont proposées [1].

Dans ce présent chapitre, nous présentons une étude théorique traitant l'impact de défauts atomiques sur les propriétés de localisation des spins, et la diffusion d'ondes de spin dans les systèmes de basses dimensions à formes tubulaires quasi-1D.

La méthode de calcul utilisée est la méthode de raccordement, [2-4], développée initialement pour l'étude des phénomènes de localisation que nous adaptons aux calculs des propriétés de transport cohérent dans les systèmes de basses dimensions à formes tubulaires. Dans la première partie, nous appliquerons ce formalisme au cas d'un défaut de substitution atomique, suivi d'un défaut lacunaire, engendrant un nanocontact atomique et dans la troisième partie, nous considérons un autre type de défaut qui un dépôt atomique.

III.I/ Diffusion d'ondes de spin en présence d'un défaut atomique

Les trois types de défauts examinés, dans ce mémoire, sont :

- i) défaut de substitution atomique
- ii) défaut lacunaire
- iii) dépôt d'atomes

III.1.1/ Description du modèle

Le système modèle de basse dimension que nous introduisons dans le cadre de ce travail est un système mésoscopique contenant un défaut de substitution de deux atomes, défaut de deux lacunes et en dernier un dépôt de deux atomes sur la structure tubulaire. Les systèmes modèles sont représentés, respectivement, sur les figures (III.1), (III.2) et (III.3).

Notons que ces modèles peuvent être obtenus en déposant de la matière sur des surfaces atomiques non planes (ayant des marches et des contre marches), de plus, nous considérons que les interactions entre les modèles et le substrat sont négligeable.

La présence du défaut atomique provoque une brisure de symétrie de la structure tubulaire et induit la modification de ses propriétés physiques. Pour relever l'impact de ces défauts sur la dynamique des spins de ces structures, nous appliquerons le formalisme de raccordement, en tenant compte uniquement des interactions entre premiers voisins [5-6].

i) Défaut de substitution de deux atomes

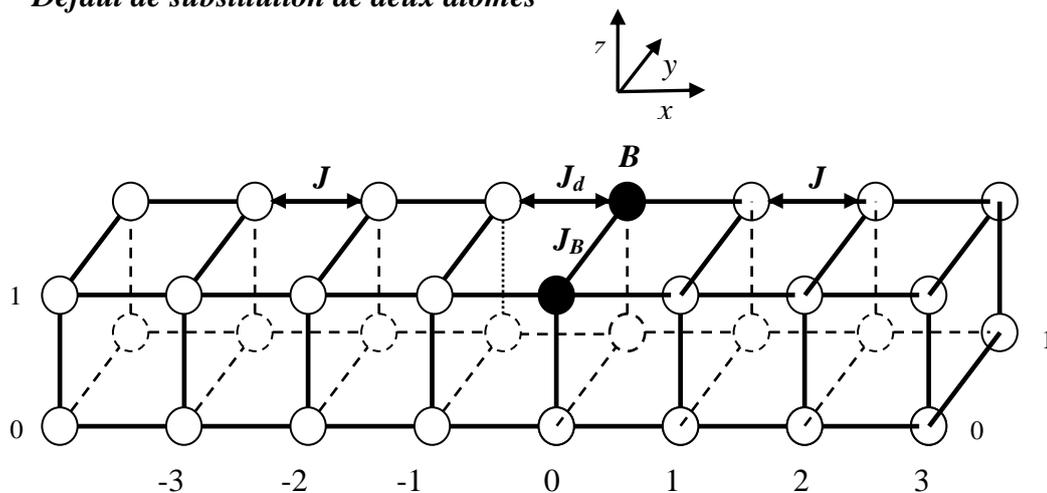


Figure (III.1) : Représentation schématique d'une structure ferromagnétique tubulaire, contenant un défaut de substitution (atomes notés B). Dans la zone perturbée, chaque site est doté d'un spin. S_B , les interactions d'échange entre sites B sont J_B et entre sites A et B sont notées J_d , et loin de la zone défaut, les interactions sont notées J .

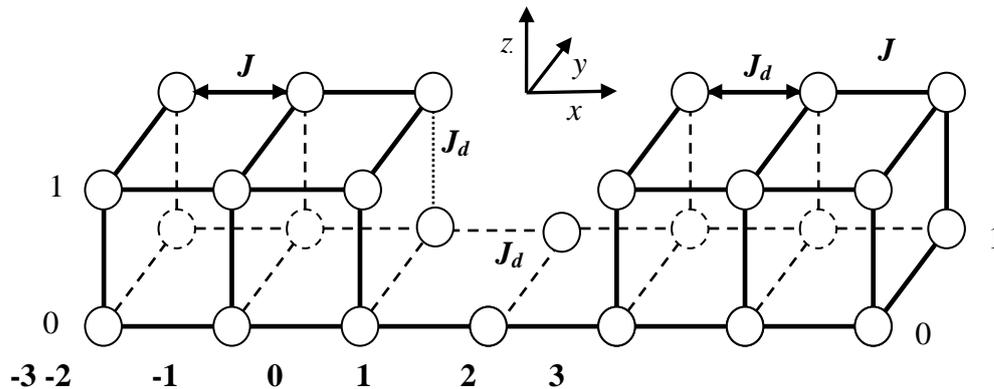
ii) *Défaut lacunaire*

Figure (III.2) : Représentation schématique d'une structure ferromagnétique tubulaire, contenant un défaut lacunaire. Dans la zone perturbée, les interactions sont notées J_d , et loin du défaut, les interactions sont homogènes et notées J .

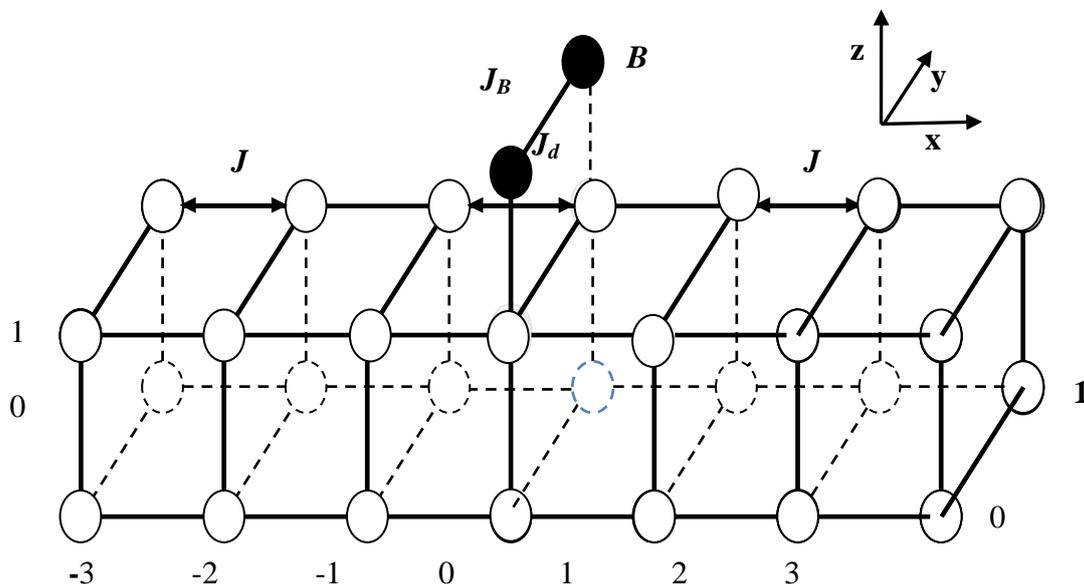
iii) *Défaut de dépôt atomique*

Figure (III.3) : Représentation schématique d'une structure ferromagnétique tubulaire, contenant un dépôt de deux atomes sur la structure (atomes notés B). Les interactions entre spins des atomes déposés sont J_B et leurs vecteurs de spin sont S_B . L'interaction entre sites A et B est J_d .

Le long de ce travail, nous notons le rapport S_B/S par S_b .

III.1.2/ Matrice dynamique du système tubulaire perturbé

La matrice dynamique M_d , trouve son origine après l'écriture des équations du mouvement de précession des spins situés dans la zone irréductibles des figures (III.1),(III.2) et (III.3), ainsi que les spins de raccordement, possédant un environnement du guide d'onde parfait. La matrice correspondante à l'écriture des équations de mouvement de ces spins donne une matrice rectangulaire qu'on note M_d , formée de n lignes et m colonnes. Elle contient plus d'inconnues que d'équations. Elle peut se s'écrire sous forme :

$$[M_d].|u\rangle = |0\rangle \quad (\text{III.1})$$

$$\text{Avec } \dim [M_d] = (n \times m) \quad (\text{III.2})$$

$$\dim .|u\rangle = m \times 1 \quad (\text{III.3})$$

$$\dim |0\rangle = n \times 1 \quad (\text{III.4})$$

La quantité $|u\rangle$ dans l'équation (III.1), représente un vecteur décrivant toutes les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la zone perturbée. Les matrices dynamiques obtenues pour chacune des trois configurations sont :

Défaut de substitution

$$[M_d].|u\rangle = |0\rangle, \text{ avec } \dim[M_d] = (12 \times 20)$$

$$\dim .|u\rangle = 20 \times 1$$

$$\dim |0\rangle = 12 \times 1$$

Défaut lacunaire

$$[M_d].|u\rangle = |0\rangle, \text{ avec } \dim [M_d] = (18 \times 26)$$

$$\dim |u\rangle = 26 \times 1$$

$$\dim |0\rangle = 18 \times 1$$

Défaut de dépôt atomique

$$[M_d].|u\rangle = |0\rangle, \text{ avec } \dim [M_d] = (14 \times 22)$$

$$\dim |u\rangle = 22 \times 1$$

$$\dim |0\rangle = 14 \times 1$$

III.1.3/ Matrice de raccordement

Le principal but, de cette partie, est d'établir les relations de raccordements entre les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant au domaine de défaut magnétique et les modes du système tubulaire parfait [5].

La connaissance simultanée des facteurs de phase ($Z, 1/Z$), caractérisant les modes magnétiques de précessions, déterminés à partir de la matrice dynamique en volume (système parfait) du système tubulaire quasi-1D, permet de définir la matrice de raccordement.

Pour cela nous allons représenter les amplitudes de précessions des vecteurs de spin situés aux sites de la région de raccordement, par une combinaison linéaire de vecteurs $\{RT\}$, définissant un espace fini. Dans le cas présent, on est en présence de deux régions de raccordement différentes, c'est pour cela que nous allons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$, la première caractérise la région de raccordement gauche (RRG) et la seconde caractérise la région de raccordement droite (RRD). Les dimensions des vecteurs unitaires $\{R\}$ et $\{T\}$ sont liés au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude préliminaire du système parfait. Ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension 4. Les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la (RRG), peuvent être alors décrites de la manière suivante :

$$u_{\alpha}(n, m, k) = \sum_{\nu=1}^4 [Z(\nu)]^{-l} \cdot R \cdot p(\alpha, \nu) \quad \text{pour } l < 0 \quad (\text{III.5})$$

De même, pour les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la (RRD), elles peuvent être décrites par :

$$u_{\alpha}(n, m, k) = \sum_{\nu'=1}^4 [Z(\nu')]^l \cdot T \cdot p(\alpha, \nu') \quad \text{pour } l > 1 \quad (\text{III.6})$$

Ici α représente les directions cartésiennes et $p(\alpha, \nu), p(\alpha, \nu')$ sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents. Ils sont déterminés à l'aide des vecteurs propres de la matrice dynamique M_d définies auparavant.

Le vecteur $|u\rangle$, décrivant les amplitudes de précessions des vecteurs de spin appartenant à la zone défaut de la structure tubulaire (voir les figures (III.1, III.2 et III.3)), peut se décomposer en deux parties : la première est partie irréductible est notée par $|irr\rangle$, elle est constituée par les amplitudes de précessions des n vecteurs de spin irréductibles formant la région du défaut. Quant à la seconde est la partie de raccordement, qui est notée par $|rac\rangle$, elle est formée par les amplitudes de précessions associées aux m vecteurs de spins raccordés, ceci pour les deux bases $|R\rangle$ et $|T\rangle$. Ainsi on écrit [1-2, 5] :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.7})$$

$$\text{avec : } \dim |irr\rangle = (n \times 1), \dim |rac\rangle = (m \times 1) \quad (\text{III.8})$$

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

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.9})$$

où I_d est une matrice identité de dimension $(n \otimes n)$; et R_1, R_2, R_3 et R_4 sont des sous matrices de dimension $((m-n)/2 \times (m-n)/2)$. Elles sont données par :

$$R_1 = \begin{bmatrix} Z(1,1).p(1,1) & Z(1,2).p(1,2) & Z(1,3).p(1,3) & Z(1,4).p(1,4) \\ Z(2,1).p(2,1) & Z(2,2).p(2,2) & Z(2,3).p(2,3) & Z(2,4).p(2,4) \\ Z(3,1).p(3,1) & Z(3,2).p(3,2) & Z(3,3).p(3,3) & Z(3,4).p(3,4) \\ Z(4,1).p(4,1) & Z(4,2).p(4,2) & Z(4,3).p(4,3) & Z(4,4).p(4,4) \end{bmatrix}$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} Z(1,1).p'(1,1) & Z(1,2).p'(1,2) & Z(1,3).p'(1,3) & Z(1,4).p'(1,4) \\ Z(2,1).p'(2,1) & Z(2,2).p'(2,2) & Z(2,3).p'(2,3) & Z(2,4).p'(2,4) \\ Z(3,1).p'(3,1) & Z(3,2).p'(3,2) & Z(3,3).p'(3,3) & Z(3,4).p'(3,4) \\ Z(4,1).p'(4,1) & Z(4,2).p'(4,2) & Z(4,3).p'(4,3) & Z(4,4).p'(4,4) \end{bmatrix}$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} Z^2(1,1).p(1,1) & Z^2(1,2).p(1,2) & Z^2(1,3).p(1,3) & Z^2(1,4).p(1,4) \\ Z^2(2,1).p(2,1) & Z^2(2,2).p(2,2) & Z^2(2,3).p(2,3) & Z^2(2,4).p(2,4) \\ Z^2(3,1).p(3,1) & Z^2(3,2).p(3,2) & Z^2(3,3).p(3,3) & Z^2(3,4).p(3,4) \\ Z^2(4,1).p(4,1) & Z^2(4,2).p(4,2) & Z^2(4,3).p(4,3) & Z^2(4,4).p(4,4) \end{bmatrix}$$

$$R_4 = \begin{bmatrix} Z^2(1,1).p'(1,1) & Z^2(1,2).p'(1,2) & Z^2(1,3).p'(1,3) & Z^2(1,4).p'(1,4) \\ Z^2(2,1).p'(2,1) & Z^2(2,2).p'(2,2) & Z^2(2,3).p'(2,3) & Z^2(2,4).p'(2,4) \\ Z^2(3,1).p'(3,1) & Z^2(3,2).p'(3,2) & Z^2(3,3).p'(3,3) & Z^2(3,4).p'(3,4) \\ Z^2(4,1).p'(4,1) & Z^2(4,2).p'(4,2) & Z^2(4,3).p'(4,3) & Z^2(4,4).p'(4,4) \end{bmatrix}$$

$$\text{En posant } M_R = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix}, \text{ le système d'équation (III.9) peut s'exprimer à l'aide :}$$

matrice de raccordement M_R comme suit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = M_R \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.10})$$

avec :

$$\dim [M_R] = (m \times n) \quad (\text{III.11})$$

En utilisant la relation (III.10), on peut réécrire le système (III.1) de la manière suivante :

$$[M_d (n \times m)] [M_R (m \times n)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (\text{III.12})$$

Soit :

$$[M_s (m \times m)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (\text{III.13})$$

Les matrices de raccordement pour les trois défauts auront les dimensions suivantes :

i) Défaut de substitution

$$\dim I_d = (4 \times 4)$$

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (4×4)

$$\dim [M_s] = (12 \times 12).$$

ii) Défaut lacunaire

$$\dim I_d = (10 \times 10)$$

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (4×4)

$$\dim [M_s] = (18 \times 18).$$

iii) Défaut de dépôt atomique

$$\dim I_d = (6 \times 6)$$

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (4×4)

$$\dim [M_s] = (14 \times 14)$$

III.1.4/ Etude de la diffusion

Considérons le cas d'un mode propageant i ($|Z_i| = 1$) provenant du guide d'ondes parfait gauche (G) et allant vers le guide d'ondes parfait droit (D) en passant par la zone perturbée, l'onde résultante diffusée par le défaut se décompose en deux parties, l'une est transmise au système tubulaire semi-infini du côté droit, l'autre réfléchi sur le système tubulaire semi-infini situé à gauche, ce qui donne naissance à un champ précessionnel dans les deux demi-espaces.

La composante cartésienne α , du champ de mouvement des spins situés en dehors de la région de défaut, peut être exprimée en utilisant la méthode de raccordement [7-8].

Les amplitudes de précessions des spins dans les trois directions cartésiennes d'un site atomique, contenant un spin, appartenant à la structure tubulaire (G) du côté gauche peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de précession du guide d'ondes parfait à la même fréquence :

$$u'_\alpha(n, m, k) = [Z(\bar{\nu})]^n \cdot p(\alpha, i') + \sum_i R_{ii'} \cdot [Z(\nu)]^{-n} \cdot \vec{p}(\alpha, i) \text{ avec } n < 0 \quad (\text{III.14})$$

De la même manière, pour un site de spin (D) du côté droit, les amplitudes de précessions peuvent s'exprimer ainsi :

$$u_\alpha(n, m, k) = \sum_i T_{ii'} \cdot [Z(\nu)]^n \cdot \vec{p}(\alpha, i) \text{ avec } n > 0 \quad (\text{III.15})$$

La quantité $R_{ii'}$, comme nous le verrons plus loin est à relier avec les coefficients de réflexions d'un mode incident i selon les modes $i' = 1, 2, 3, 4$ du système tubulaire parfait (G) pour une fréquence donnée. De même, la quantité T_{ij} est associée aux coefficients de transmissions du mode incident i selon les modes propres $j = 1, 2, 3, 4$ à droite. Les coefficients $p(\alpha, i)$ et $p'(\alpha, i)$ représentent les poids pondérés associés aux mouvement de précessions des spins u_α et u'_α des sites appartenant aux deux demi-espaces parfaits.

Les coefficients de réflexion et de transmission R et T sont respectivement calculés pour un mode propageant i , sachant que i' et j décrivent des modes qui peuvent être propageants ou évanescents dans la fenêtre des fréquences dans laquelle i est propageant.

Comme nous l'avons signalé auparavant, les quantités $T_{\bar{v}}$ et $R_{\bar{v}}$ introduites dans les équations précédentes, permettent d'obtenir toutes les grandeurs physiques intéressantes [9-10]. Parmi ces grandeurs, on peut citer les coefficients de réflexions et de transmission ainsi que la conductance magnonique.

III.1.4.1/ Calcul des coefficients de transmission et de réflexion

Soit $|RT\rangle$ le vecteur de base pour les coefficients de réflexion et de transmission et $|irr\rangle$ le vecteur formé par les amplitudes de précessions des spins des sites irréductibles de la région de défaut.

En utilisant les équations (III.12) et (III.13), on peut alors, écrire les équations de mouvements des spins formant le défaut, et obtenir un système d'équations inhomogènes de la forme suivante [1] :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} + |IH\rangle \quad . \quad (\text{III.16})$$

Où le vecteur $|IH\rangle$ regroupe les termes inhomogènes décrivant l'onde incidente.

En multipliant l'équation (III.16) par la matrice $[M_d]$ on obtient alors :

$$[M_d]|u\rangle = [M_d] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_d][M_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} + [M_d]|IH\rangle \quad (\text{III.17})$$

Ce qui peut se résumer à :

$$[M_d][M_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_S] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = -[M_d]|IH\rangle \quad (\text{III.18})$$

Ou encore

$$\begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = -[M_S]^{-1}[M_d] \quad (\text{III.19})$$

La solution du système d'équations(III.19) prend compte des amplitudes des spins, et le vecteur $|irr\rangle$ de la région de défaut ainsi que des grandeurs R_{ii} et T_{ij} pour une fréquence incidente Ω .

Les coefficients de transmission t_{ij} et de réflexions r_{ii} peuvent alors être calculés en prenant soin de les normaliser à l'aide des vitesses de groupes, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité de la somme des parties réfléchie et transmise [2].

Plus précisément, pour des ondes provenant du côté gauche du défaut selon le mode propre i , le coefficient de réflexion est donné par :

$$r_{ii} = \frac{v_i}{v_i} |R_{ii}|^2 \quad (\text{III.20})$$

Et le coefficient de transmission par :

$$t_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2 \quad (\text{III.21})$$

Notons que v_i , représente la vitesse de groupe du mode propre i . Elle est nulle pour les modes évanescents du guide d'onde parfait. En effet, les modes évanescents sont nécessaires pour une description totale de la dynamique de précession et pour la diffusion d'ondes de spin bien qu'ils ne contribuent pas au transport d'énergie.

Nous pouvons également définir les probabilités de réflexion et de transmission pour un mode propre i donné à la fréquence de diffusion Ω , à l'aide des expressions suivantes :

$$r_i = \sum_i r_{ii} \quad (\text{III.22})$$

$$t_i = \sum_j t_{ij} \quad (\text{III.23})$$

La relation d'unitarité, qui veut que la somme de transmissions et de réflexions soit égale à l'unité est alors décrite par la relation suivante [1-3] :

$$s = \sum_i (t_i + r_i) = 1 \quad (\text{III.24})$$

Nous avons systématiquement exploité cette relation pour contrôler nos calculs lors de la simulation.

Pour la même configuration de défaut, nous examinons trois possibilités de l'environnement magnétique, à savoir : adoucissement, homogénéité et durcissement de l'échange magnétique au niveau du domaine perturbé $\gamma = J_d/J = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

III.1.4.2/ Conductance magnonique

Afin de décrire la transmission globale des ondes de spin à travers les zones perturbées du système ferromagnétique tubulaire quasi-1D, il est très utile de définir par analogie avec la conductance électronique et phononique qui sont liées aux phénomènes de diffusion [11], la conductance magnonique d'un défaut pour une énergie donnée Ω . Cette conductance (ou transmittance) notée $\sigma(\Omega)$ est donnée par la somme des coefficients de transmissions dans les modes propageants du système parfait [12].

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (\text{III.25})$$

où la sommation étant effectuée sur tous les modes propageant à une énergie Ω .

Pour un guide d'onde parfait (non perturbé) la conductance magnonique σ est un entier qui donne simplement le nombre de modes propageant à l'énergie considérée. Par contre, en présence d'un défaut, σ n'est plus entier et l'écart entre la valeur de σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion de l'onde de spin sur le défaut [1].

III.1.4.3 / Les résultats obtenus pour la transmission totale de magnon en présence des trois défauts examinés :

i) Défaut de substitution

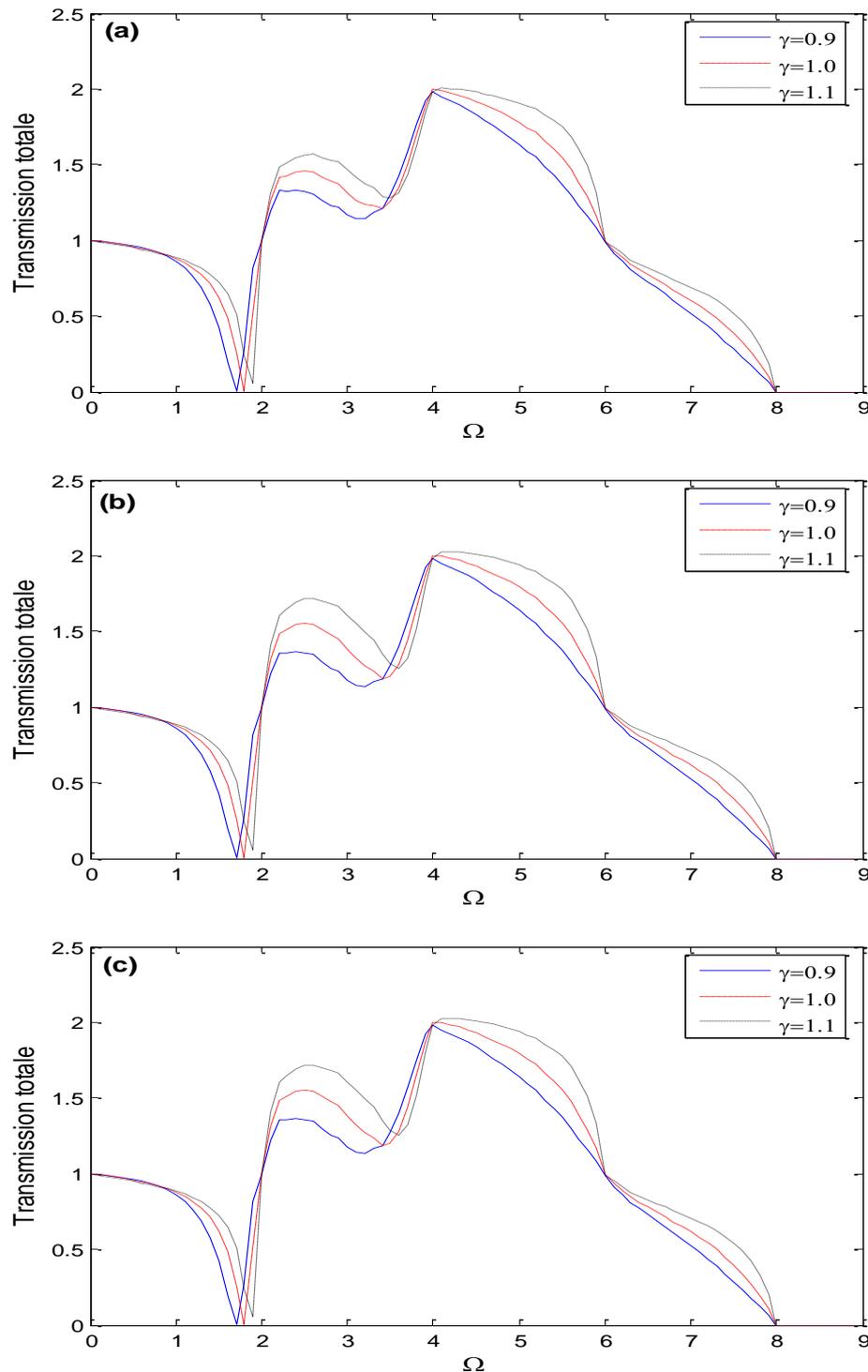


Figure (III.1.1.1) : Transmission totale de magnon via l'interface magnétique en présence des atomes substitués, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour une valeur $S_b = \frac{1}{2}$ et les paramètres $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

a) $J_B < J_d$.

b) $J_B = J_d$.

c) $J_B > J_d$.

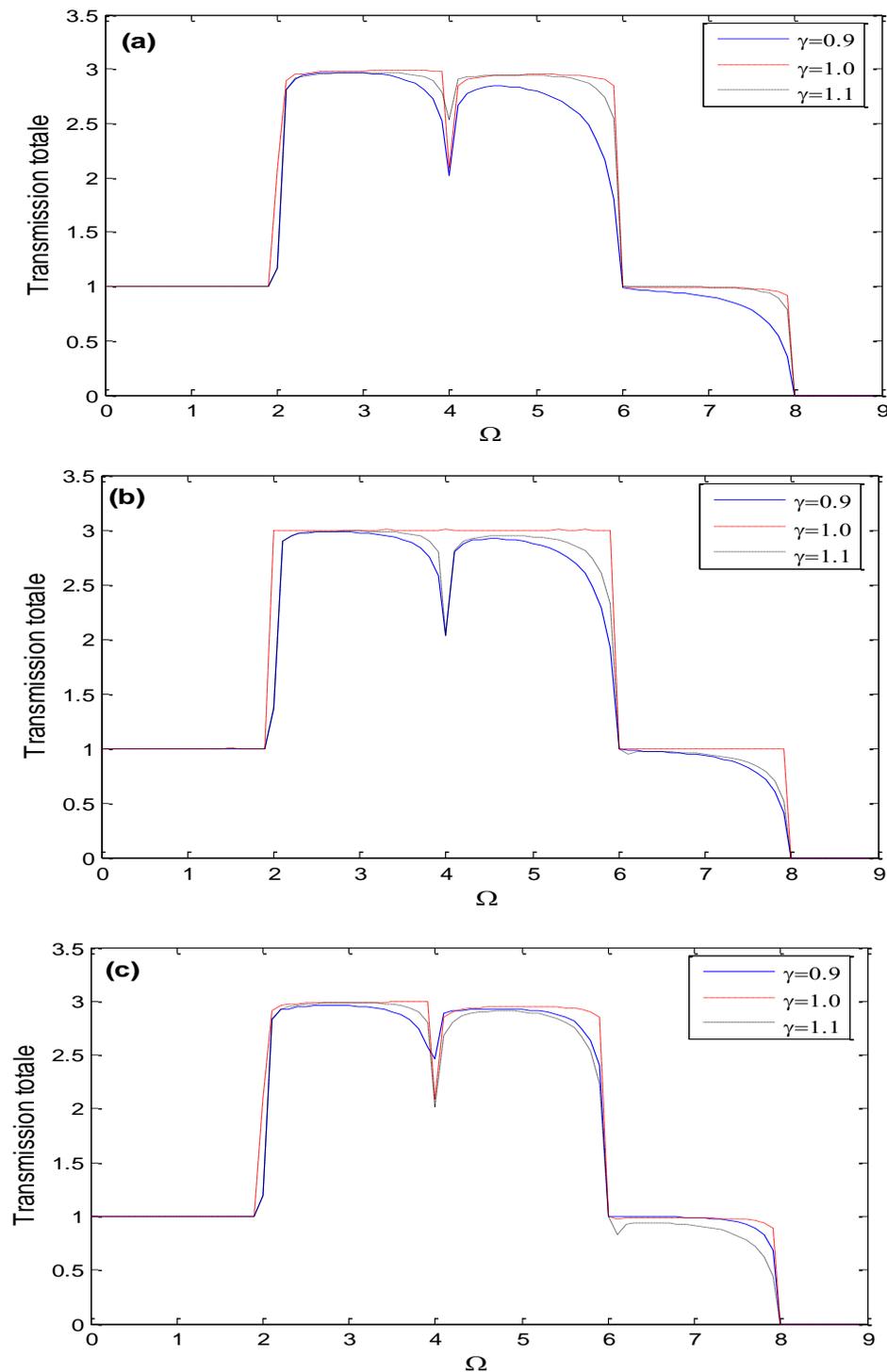


Figure (III.1.1.2) : Transmission totale de magnon via l'interface magnétique en présence des atomes substitués, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour une valeur $S_b = 1$ et les paramètres $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

- a) $J_B < J_d$.
- b) $J_B = J_d$.
- c) $J_B > J_d$.

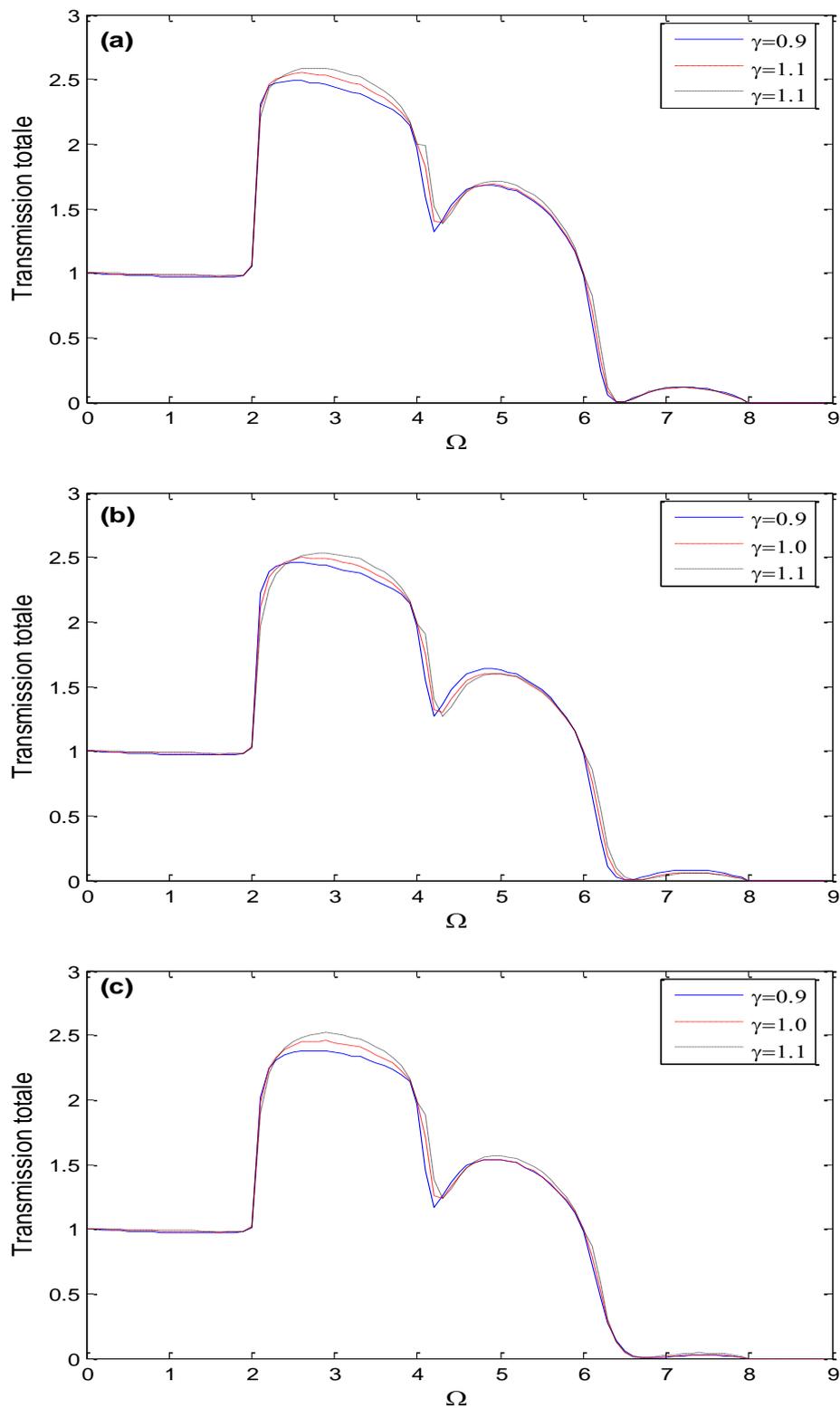


Figure (III. 1.1.3) : Transmission totale de magnon via l'interface magnétique en présence des atomes substitués, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour une valeur $S_b = 2$ et les paramètres $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

a) $J_B < J_d$.

b) $J_B = J_d$.

c) $J_B > J_d$.

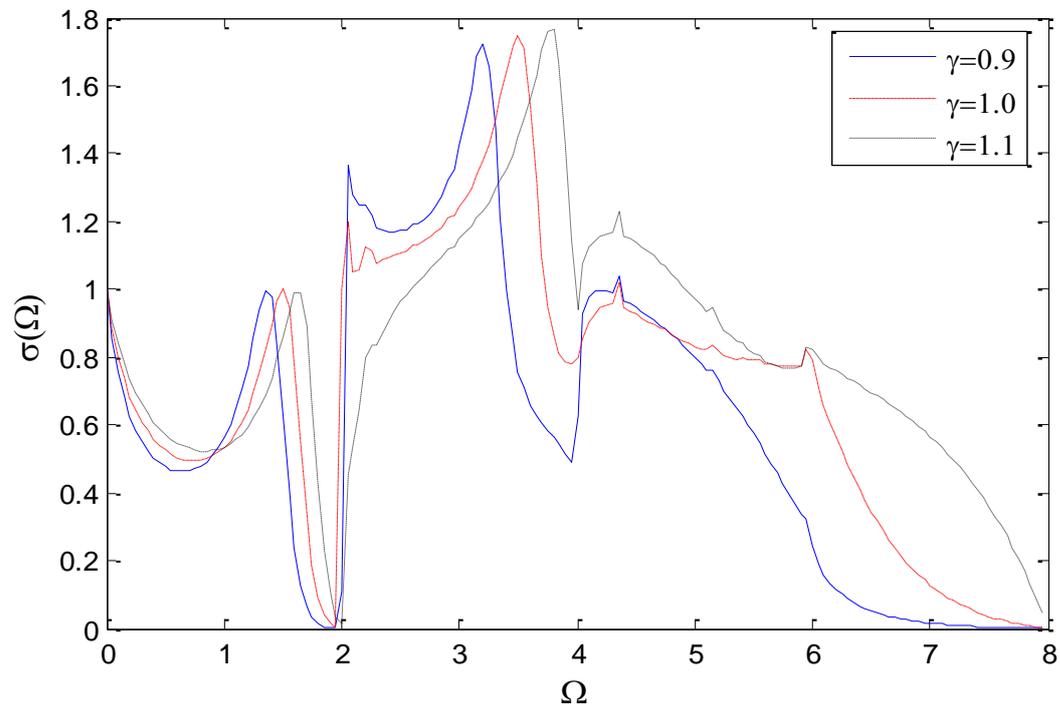
ii) *Défaut lacunaire*

Figure (III.2.1.1) : Transmission totale de magnons via un nanocontact magnétique (engendré par les lacunes), en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour les trois possibilités $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

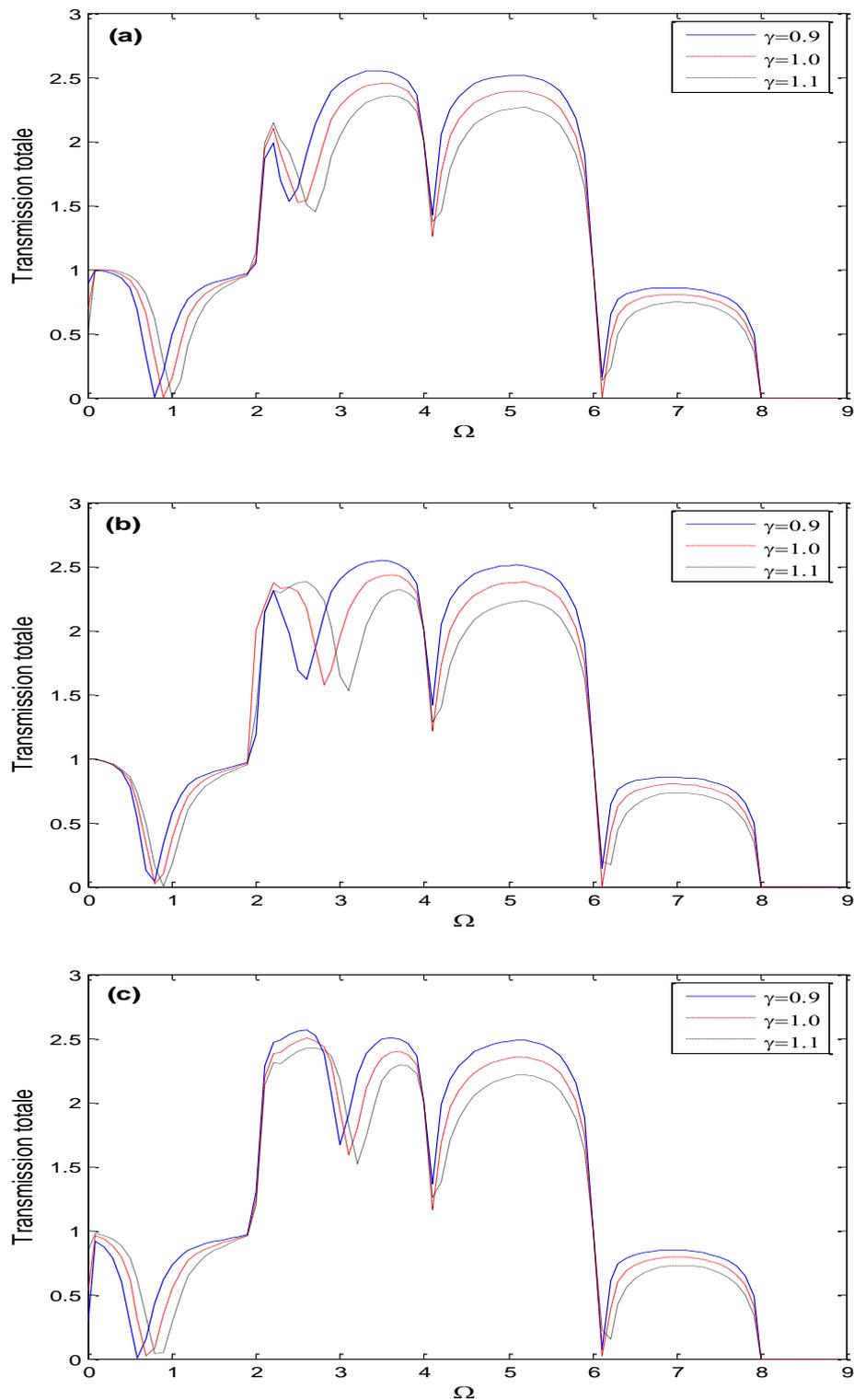
iii) *Défaut de dépôt atomique*

Figure (III.3.1.1) : Transmission totale de magnon via l'interface magnétique en présence d'un dépôt atomique, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour les valeurs $S_b = \frac{1}{2}$ et les paramètres $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

- a) $J_B < J_d$.
- b) $J_B = J_d$.
- c) $J_B > J_d$.

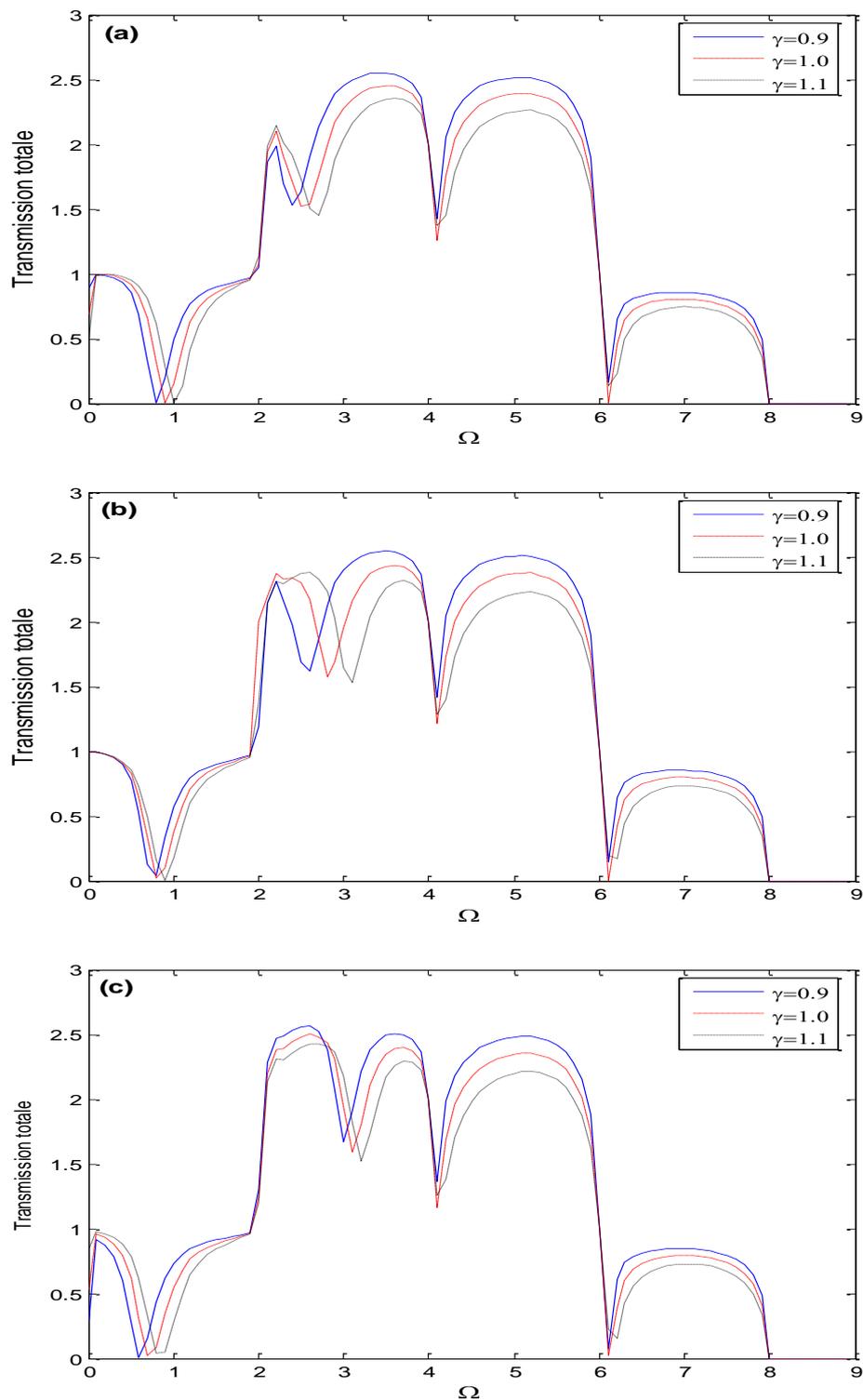


Figure (III.3.1.2) : Transmission totale de magnon via l'interface magnétique en présence d'un dépôt atomique, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour les paramètres $S_b = 1$ et $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

a) $J_B < J_d$.

b) $J_B = J_d$.

c) $J_B > J_d$.

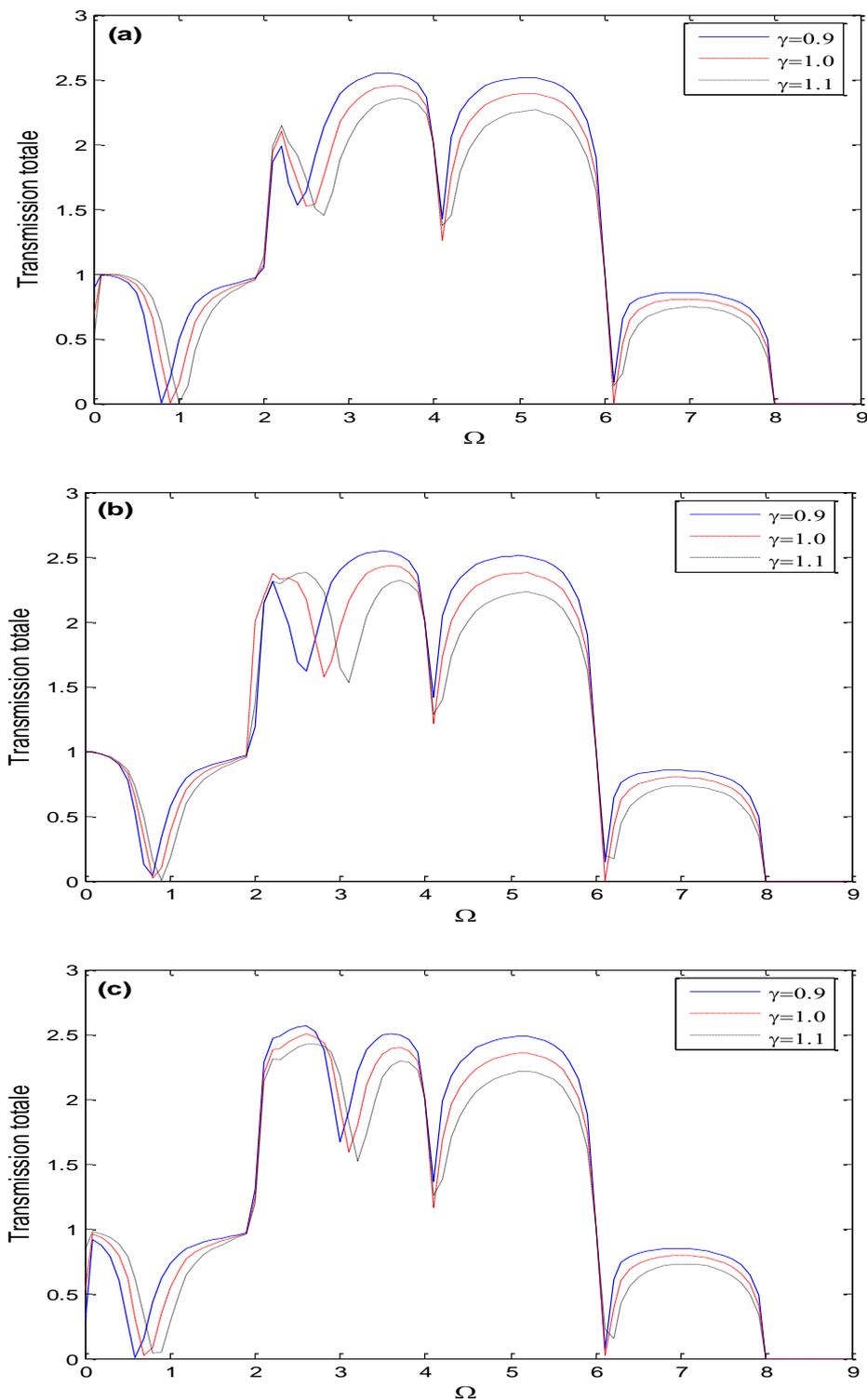


Figure (III.3.1.3) : Transmission totale de magnons via l'interface magnétique en présence d'un dépôt atomique, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , pour une valeur $S_b = 2$ et $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

a) $J_B < J_d$.

b) $J_B = J_d$.

c) $J_B > J_d$.

III.1.4.4 / Discussion des courbes

Nous avons présenté les résultats numériques concernant la diffusion d'ondes de spin, dans un système ferromagnétique, se propageant de gauche vers la droite dans une structure tubulaire composés de quatre chaînes parallèles deux à deux, déposées sur un substrat non magnétique.

Les résultats de simulations numériques de notre modèle sont présentés pour trois types de défauts ; le premier correspond à la substitution de deux atomes de la structure tubulaire par deux autres atomes de nature différente, le deuxième est un défaut lacunaire engendré par le retrait de deux atomes à partir de la structure parfaite et le troisième correspond au dépôt de deux atomes de nature différente sur la structure idéale. Les systèmes tubulaires en présence des trois défauts mentionnés sont représentés sur les figures (III.1) (III. 2) et (III.3).

Pour chaque défaut, nous avons analysé la diffusion d'ondes de spin via les zones contenant les trois inhomogénéités citées, et ce dans les trois cas probables γ de l'environnement magnétique dans les zones perturbées. Nous avons choisi les valeurs suivantes : $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 . Pour les possibilités $\gamma < 1$ ($\gamma > 1$), un adoucissement (durcissement) magnétique a pris place dans le domaine perturbé. Pour $\gamma = 1$, l'échange est identique partout (cas homogène).

Nous rappelons que la conductance magnonique (ou transmittance d'un système) est définie comme étant la contribution de l'ensemble des modes à la transmission d'ondes de spin, autrement dit, c'est la somme des coefficients transmission individuel de tous les modes propageants du système.

i) Défaut de substitution

Sur les figures (III.1.1.1), (III.1.1.2) et (III.1.1.3), nous avons tracé les courbes de transmission totale (appelées aussi conductances magnoniques, ou transmittance de défaut de substitution) de la structure représentée sur la Figure (III.1). Ces courbes sont données en fonction de l'énergie de diffusion Ω . Elles résultent de la contribution des quatre modes propageants de la structure tubulaire quasi-1D en même temps. Rappelons, qu'on peut aussi tracer les contributions individuelles correspondant à chaque mode séparément, ce qui représente les coefficients de transmission et de réflexion, mais dans ce mémoire ces résultats ne sont pas donnés.

Les transmissions totales sont rangées en une seule colonne pour décrire les variations de l'échange magnétique local entre les spins substitués dans le domaine perturbé, allant de l'adoucissement en haut au durcissement en bas. Elles sont rangées aussi en lignes, notées (a),

(b) et (c), pour décrire l'influence et l'effet de l'intensité du spin des sites substitués. La première ligne (a) décrit une situation où l'intensité du vecteur de spin B est inférieure à celle du système tubulaire parfait ; la deuxième ligne (b) correspond à une valeur de spin identique partout; la dernière ligne (c) donne le cas où le spin de B est supérieur à celui du système parfait.

Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine d'existence de la plage de propagation des modes propageants de la structure tubulaire parfaite quasi-1D, là où les vitesses de groupe sont non nulles.

Dans le cas des paramètres : $S_b = 0.5, 1.0, 2.0$, respectivement, les spectres de conductances magnoniques sont importantes pour $S_b = 1$, puis elles commencent à subir une décroissance de leurs valeurs maximales jusqu'à l'obtention de transmissions minimales (et même nulles à la fréquence $\Omega = 1.80$) dans le cas $S_b = 0.5$.

La valeur la plus grande et même totale de $\sigma(\Omega)$ est donnée sur la Fig.(III.1,1,2b), pour $\gamma = 1.0$. D'ailleurs, la courbe de conductance présente trois paliers différents. Pour $\Omega \in [0, 2]$, $\sigma = 1$; $\Omega \in [2, 6]$, $\sigma = 3$ et $\Omega \in [6, 8]$, $\sigma = 1$. Ces derniers indiquent clairement le nombre de modes propageants excités aux différents intervalles de fréquences. Cette courbe est en parfaite accord avec les modes de magnons qui sont tracés sur la Fig.(II.2) du chapitre II, réservé au tracé des courbes de dispersion, issues de dynamique de la structure tubulaire parfaite. La différence entre la courbe $\sigma(\Omega)$ de la figure (III.1.1.2b) et les $\sigma(\Omega)$ des autres paramètres donne une mesure de la réflexion totale causée par la présence du défaut.

Sur la figure (III.1.1.3), dans l'intervalle de fréquence $\Omega \in [0, 2]$, la conductance magnonique est totale, cela signifie que l'effet de l'interface se fait pas sentir aux basses énergies dans la plage de définition du mode concerné pour des intensités de spin $S_b \geq S$ du système parfait. Dans ce cas, nous pouvons penser que les ondes de spin de basses énergies ont une énergie suffisante pour franchir le défaut. Quand à la décroissance de la transmission totale, au fur et à mesure qu'on diminue l'intensité du spin, elle peut être expliquée comme suit : au cours de leur déplacement, les ondes de spin interagissent avec les différents modes localisés du système, qui sont forcément plus énergétique dans ce cas, ce qui mène à une décroissance de leurs énergies, dans cette situation, on déduit que la longueur d'onde est inférieure devant le paramètre du réseau, par conséquent les ondes de spin ne peuvent plus franchir l'interface facilement qu'auparavant. Ce qui explique la faible transmission dans le même intervalle de fréquence $\Omega \in [0, 2]$ pour le cas $S_b = 0.5$.

Toujours, dans le cas de $S_b = 0.5$, et dans l'intervalle d'énergie $\Omega \in [2, 8]$, on observe deux pics aux positions $\Omega = 2.2$ et $\Omega = 4.0$ qui représentent des oscillations de type Fano. Le premier pic se décale vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique dans la zone perturbée, par contre, le deuxième pic reste localisé et insensible aux variations magnétiques dans le domaine interface, ce qui s'explique, probablement la particularité de ce point, par le fait que à cette position de fréquence uniquement ($\Omega = 4.0$) les quatre modes se rencontrent et contribuent ensemble à la dynamique des spins de la structure tubulaire quasi-1D.

ii) Défaut lacunaire

La figure (III.2.1.1) présente l'allure de la transmission totale via le nanocontact engendré par la présence des deux lacunes, en fonction de l'énergie de diffusion Ω , obtenue pour les trois possibilités de γ (0.9, 1.0 et 1.1). Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine d'existence de la plage de propagation, là où les vitesses de groupe sont non nulles, comme le cas précédent.

Dans ce cas, la conductance σ passe par une valeur nulle aux environs de $\Omega = 1.80$, puis elle augmente pour atteindre sa valeur la plus grande (son maximum), dans l'intervalle de fréquence $\Omega \in [2.0, 3.5]$, puis elle décroît à nouveau jusqu'à s'annuler aux bords de la zone de Brillouin.

La transmission totale $\sigma(\Omega)$, subit de fortes oscillations dans l'intervalle $\Omega \in [0, 8]$. Nous observons trois oscillations de type Fano, aux positions de fréquences suivantes : $\Omega = 1.35, 2.10, 3.20$. Nous remarquons que les courbes de la conductance magnonique se décalent systématiquement vers les hautes énergies avec le durcissement des intégrales d'échange dans le domaine nanocontact. De plus, on enregistre en même temps une légère augmentation de l'intensité de la conductance magnonique σ .

Nous signalons, aussi sur les courbes de σ la présence d'autres oscillations de nature différentes que les celles mentionnées précédemment, elles ne sont pas dues aux interactions entre le continuum et les modes localisés au niveau du défaut localisés formant le nanocontact, mais plutôt aux interactions entre les quatre modes propageants eux même.

iii) Défaut dépôt atomique

Les résultats, de nos applications numériques, présentés dans ce paragraphe concerne la configuration géométrique représentée sur la figure (III.3). Nous avons analysé la propagation et la diffusion d'ondes de spin ferromagnétiques se propageant de gauche vers la droite d'un dépôt atomique sur une facette de la structure de spins parallèles et à forme tubulaire.

Sur les figures (III.3.1.1), (III.3.1.2) et (III.3.1.3), nous avons tracé les courbes de la conductance magnonique du système perturbé contenant un dépôt de deux atomes sur une structure tubulaire quasi-1D, en fonction de l'énergie de diffusion Ω pour différents valeurs de l'échange magnétique dans la zone perturbée du système. Cette conductance qui est définie comme étant la transmission totale de magnons sur tous les modes propageants, est très sensible aux variations uniquement de certains paramètres du système.

En effet, pour une valeur fixe de l'intensité du spin (S_b), nous remarquons plusieurs pics de largeurs différentes. De plus, la transmission totale passe par zéro en deux positions de fréquence, par exemple dans le cas (a), $\Omega = 0.85$ et $\Omega = 6.10$. Nous constatons que les spectres de transmission et les deux positions se décalent vers les hautes fréquences avec la variation de γ de l'adoucissement vers le durcissement en passant par l'homogénéité (0.9, 1.0 et 1.1) (voir la même courbe) et se décalent vers les basses fréquences avec le durcissement de J_B (en faisant une comparaison entre (a), (b) et (c) de la même figure).

Parallèlement à la double influence sur la conductance magnonique que nous avons mentionnée sur la même figure, en même temps, on enregistre aucun changement sur des spectres de transmission en comparant les figures (III.3.1.1), (III.3.1.2) et (III.3.1.3), correspondant à la variation de l'intensité de spin, lorsque S_b augmente, et prend les valeurs $S_b = \frac{1}{2}$, 1 et 2. Nous remarquons que, les courbes de σ , situées dans la même ligne dans les trois cas (a), (b) et (c) sont identiques.

III.2/ Etats de magnons localisés

III.2.1/ Etats des magnons localisés au voisinage d'un défaut atomique

L'objectif de ce paragraphe est d'étudier les états localisés de magnons induit par la présence d'une inhomogénéité magnétique. Le calcul se base essentiellement sur la méthode de raccordement, introduite initialement pour l'étude des phénomènes vibrationnels [17-20]. Ensuite, à partir de 1994, la méthode a été appliquée et adaptée par certains auteurs [8,13-16] à l'étude des modes de magnons localisés en surface des structures magnétiques frustrées.

Les systèmes auxquels nous allons calculer les états de magnons localisés, sont présentés sur les figures (III.1), (III.2) et (III.3).

Pour les différentes valeurs de γ et de l'intensité du spin S_b , les états localisés de spin au voisinage de chaque zone perturbée dans les trois configurations de défauts envisagées dans ce mémoire, sont obtenus en calculant le déterminant de la matrice de l'équation (III.13).

$$\det [M_S(m \times m)] = 0 \quad (\text{III.26})$$

III.2.2/ Les résultats obtenus

i) Défaut de substitution atomique

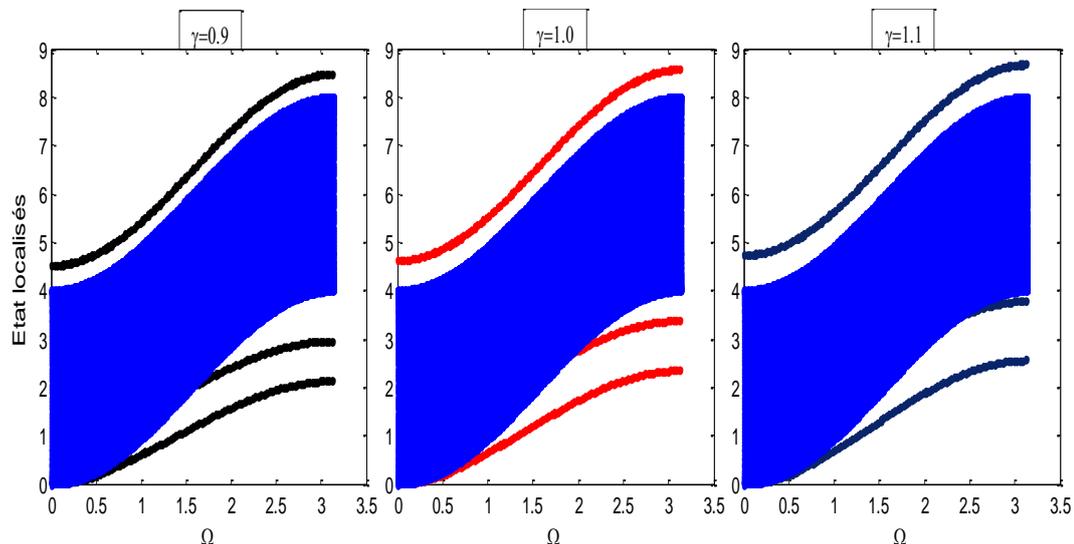


Figure (III.1.2.1): Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut de substitution (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 1/2$.

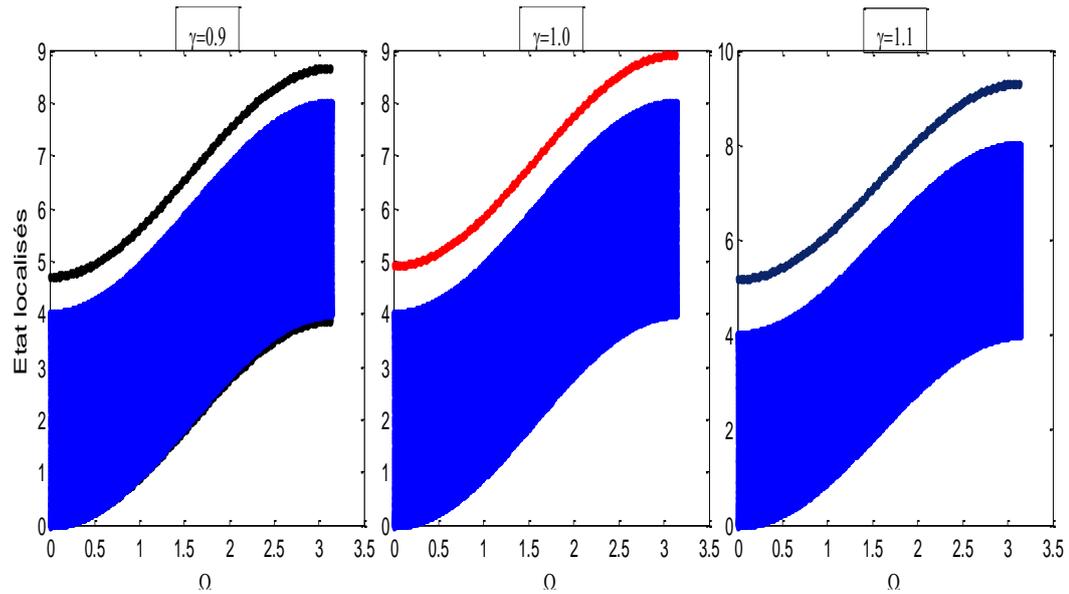


Figure (III.1.2.2) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut de substitution (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 1$.

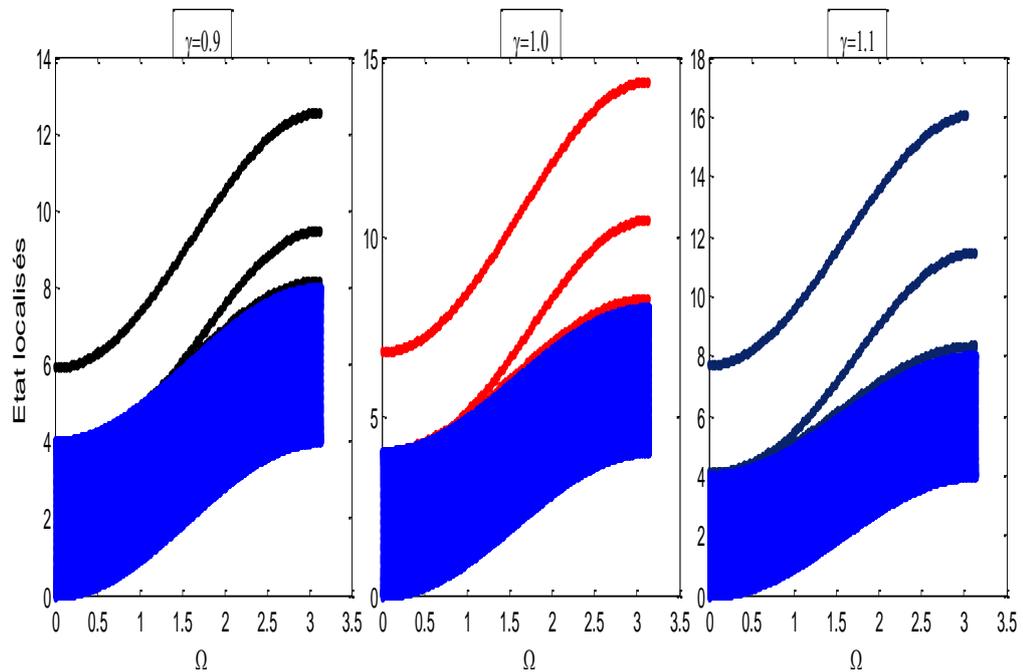


Figure (III.1.2.3) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut de substitution (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1 , pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 2$.

ii) Défaut lacunaire

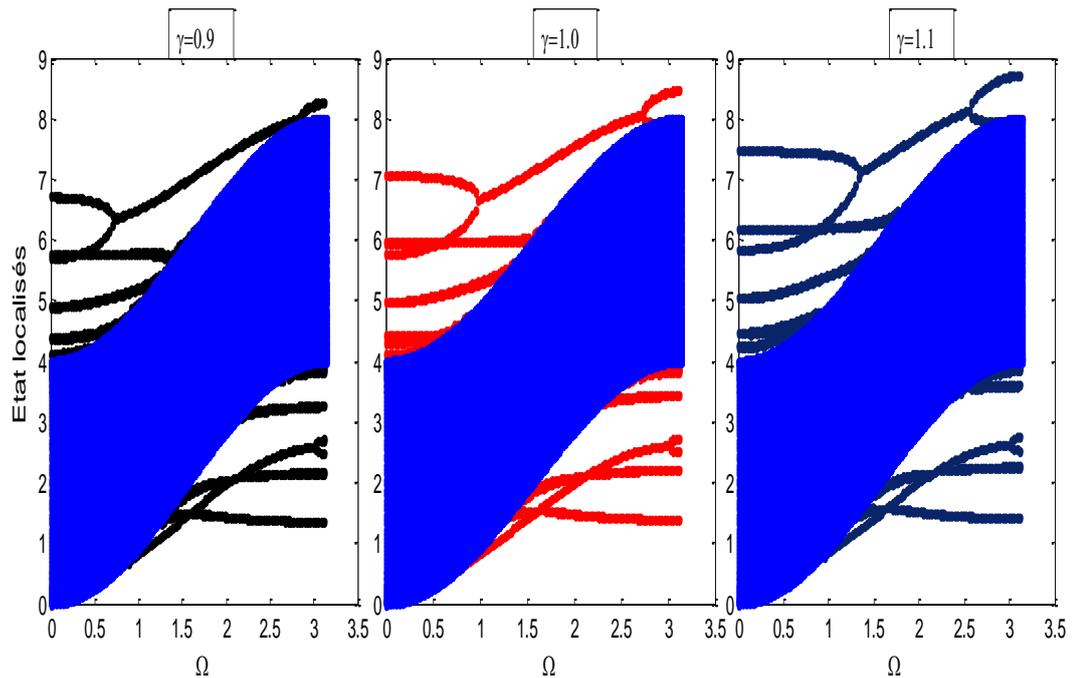


Figure (III.2.2.1) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut lacunaire (en pointillés) pour différentes valeurs de γ .

iii) Dépôt atomique

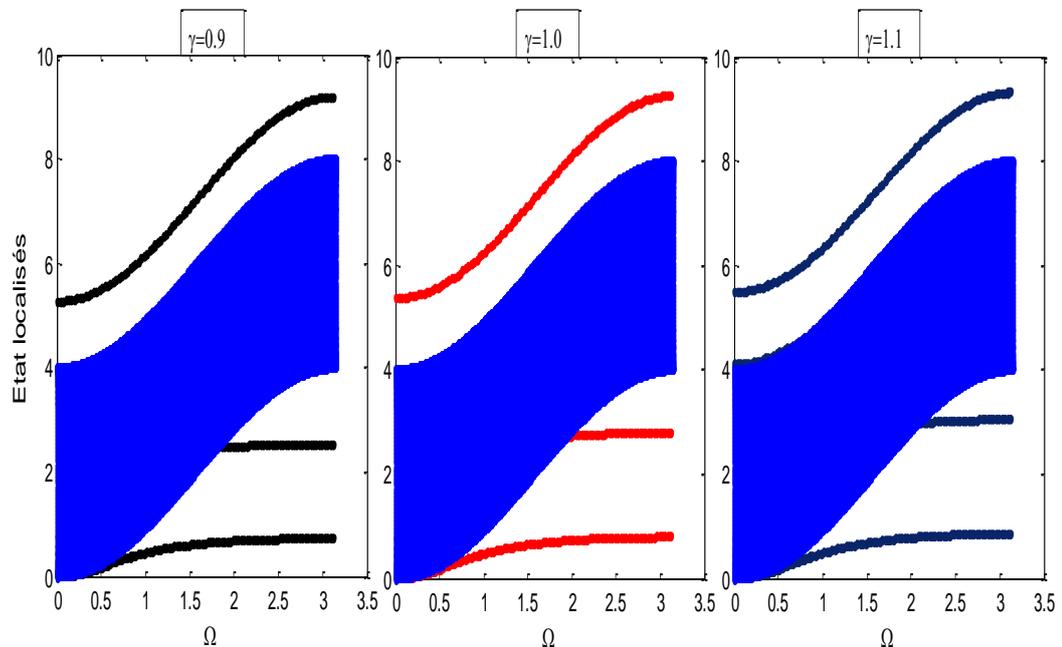


Figure (III.3.2.1) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut dépôt atomique (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$

et 1.1, pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 1/2$.

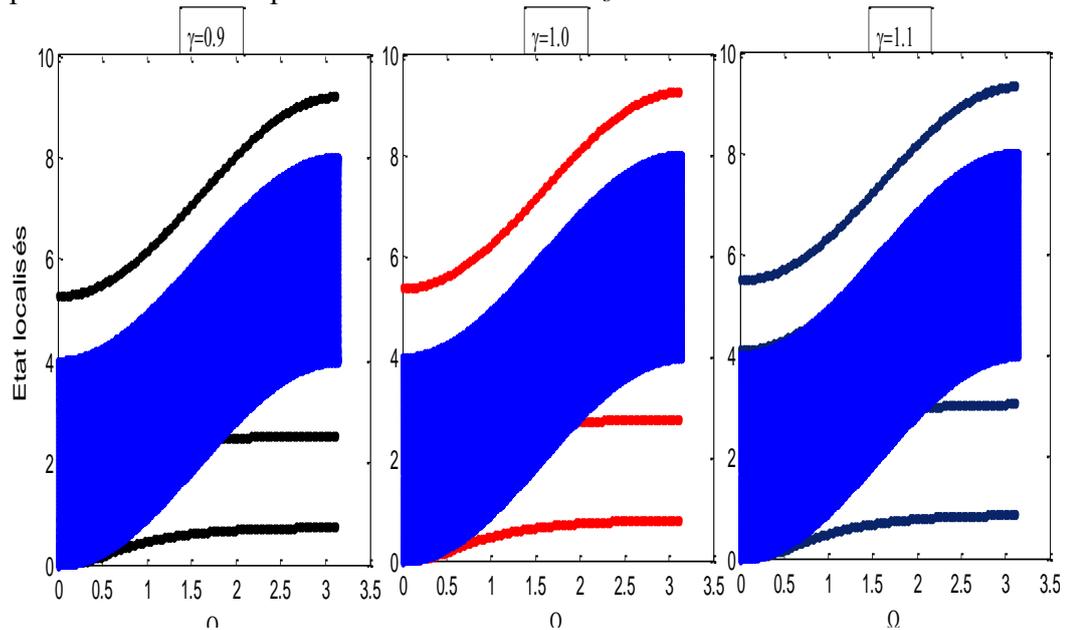


Figure (III.3.2.2) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut dépôt atomique (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1, pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 1/2$.

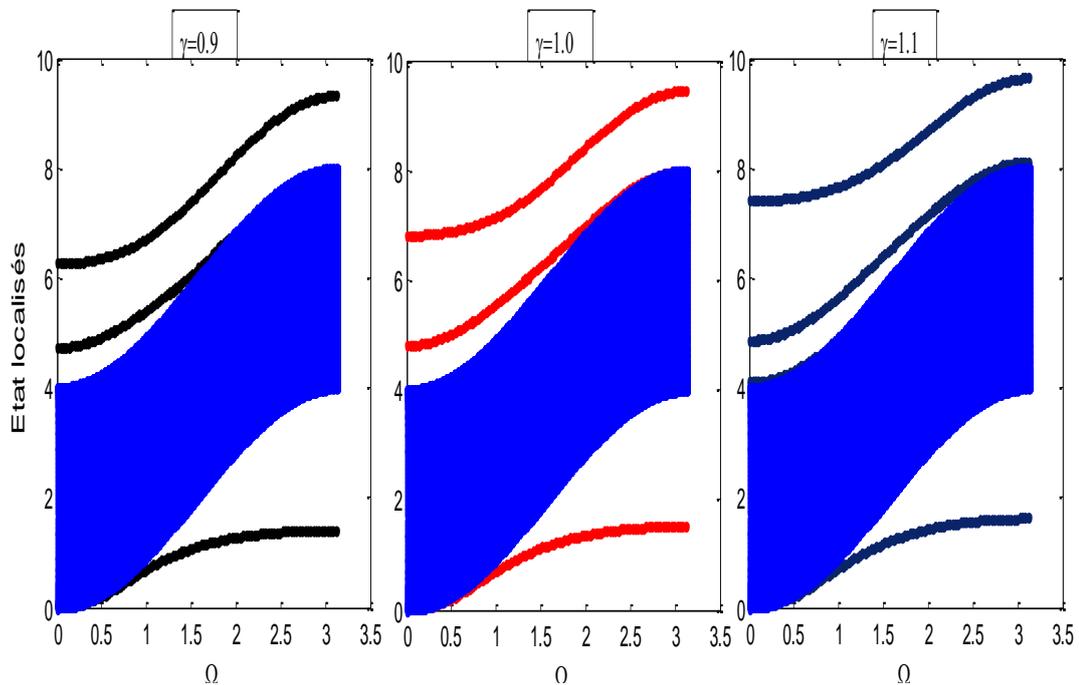


Figure (III.3.2.3) : Limites des bandes passantes des magnons du système tubulaire parfait (en continue), avec les modes localisés au voisinage du défaut dépôt atomique (en pointillés) pour différentes valeurs de $\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1, pour une valeur de spin de l'atome substitué $S_b = 2$.

III.2.1.12/ Discussion des résultats

La première constatation nous amène à dire que la méthode de raccordement appliquée dans ce travail de mémoire, rend compte de façon assez satisfaisante des courbes de dispersion de magnons au voisinage des zones nanostructurées. Des simulations sont faites pour des différentes valeurs de spins données pour le système ferromagnétique à forme tubulaire quasi-1D.

Les états de volume sont représentés par la surface continue (bleu) et les modes localisés sont montrés en pointillés (rouge) sur l'ensemble des figures. Les courbes sont rangées en une seule ligne et trois colonnes. Ces dernières, de gauche à droite, indiquent les variations de γ (allant de l'adoucissement au durcissement). La meilleure façon de procéder pour mettre en évidence l'effet des différents paramètres du système, sur les états de magnons localisés au voisinage du nanocontact, est de fixer certains d'entre eux et faire varier uniquement le paramètre dont on veut voir l'influence.

i) *Défaut de substitution*

Sur les courbes (III.1.2.1), (III.1.2.2) et (III.1.2.3), nous avons représenté les états de magnons de la structure tubulaire parfaite formée de quatre chaînes atomiques à disposition 3D et parallèles deux à deux (appelé couramment états de volume), ainsi que les courbes des états de magnons localisés au niveau de la zone interface contenant des atomes substitués et servant comme étant un joint entre les deux semi-infinies structures tubulaires.

Le calcul numérique appliqué dans le cas de $S_b = 1/2$, révèle la présence de deux modes localisés au dessous de la bande de volume et l'un des deux est acoustique (c-à-dire tendant vers zéro lorsque Ω tend vers zéro) et le troisième mode est optique, et de plus se trouvant au dessus de la bande de volume. Avec le durcissement des intégrales d'échange locales, dans la perturbée, on constate que les trois modes localisés leurs positions (dessous ou dessus) mais deviennent de plus en plus énergétiques.

Pour un spin $S_b = 1$, on constate que les deux modes localisés des spins se trouvant au dessous de la bande de volume dans le cas précédent vont être à l'intérieur des états de continuum. Par conséquent, il reste que le troisième mode optique au dessus de la bande de volume.

Pour $S_b = 2$, les trois modes localisés deviennent tous optiques et au dessus des états de volume, et de plus, ils sont très énergétiques avec le durcissement de γ .

On remarque aussi que les états de l'interface s'incurvent très fortement, montrant une forte instabilité des états de spin dans une direction quelconque, ce qui conduit à conclure que la structure magnétique se trouve dans une situation de perpétuel réarrangement de spins pour obtenir des états stables.

La comparaison entre les trois figures (III.1.2.1), (III.1.2.2) et (III.1.2.3), nous amène à dire que pour des valeurs du spin croissant l'interaction entre les modes du continuum et les états localisés de l'interface sont importante avec la croissance de S_b .

ii) Défaut lacunaire

Les courbes de la figure (III.2.2.1) montrent les états des magnons de volume (structure tubulaire parfaite), ainsi que les courbes des états de magnons du nanocontact dans le cas de la structure ferromagnétique à forme tubulaire en présence de lacunes.

Nous remarquons sur ces figures, que le nombre de branches de magnons localisés qui apparaissent est plus important que celui qu'on a déjà vu, dans le cas du défaut de substitution. Cela est essentiellement dépendant de la nature du défaut atomique présent dans la structure tubulaire étudiée dans ce travail.

Nous observons l'existence d'états de magnons localisés au voisinage du nanocontact magnétique. Il y a des modes au dessous et au dessus de la bande de volume et leur quantité est différente.

En fonction de γ , les branches observées se décalent vers les états les plus énergétiques avec le durcissement des intégrales d'échange de la zone nanocontact. La multiplication de nombre de branches est certainement due à une forte interaction entre les modes propageant du volume et les modes oscillant dans la zone défaut lui-même qui possède des bords dans ce type de brisure de symétrie.

iii) Dépôt atomique

Les courbes (III.3.2.1-3), (III.3.2.1-3) et (III.3.2.1-3) montrent les états de magnons de la structure tubulaire parfaite formée de quatre chaînes atomiques à disposition 3D et parallèles deux à deux, ainsi que les courbes des états des magnons de la zone interface contenant un dépôt atomique sur la facette de la structure tubulaire.

Sur la figure (III.3.2.1) relative au cas où $S_b = \frac{1}{2}$, nous notons l'existence de trois modes aussi. Deux sur trois sont situés au dessous de la bande du continuum et l'un des deux est acoustique, et le troisième, se trouve au dessus des états de volume. Ces modes localisés se décalent vers le haut et deviennent plus énergétiques avec le durcissement de l'environnement

magnétique dans la zone nanostructurée du système tubulaire ferromagnétique. De plus, la dispersion des magnons et la largeur de ces bandes dépend fortement aussi du paramètre γ .

Le calcul numérique dans le cas $S_b = 1$, donne deux branches au dessous du continuum et leur énergie de plus en plus importante. L'intervalle de fréquence qui sépare les branches est proportionnel à S_b .

La figure (III.3.2.2) décrit la situation où $S_b = 2$, les interactions d'échanges au voisinage du défaut vont créer uniquement un seul mode acoustique, au dessous des états du volume et les deux autres sont de nature identique, (optiques) et se trouvant en dessus du continuum. Et les énergies, associées aux états localisés, sont importante devant celle du cas correspondant à $S_b = 1$, qui est à son tour plus énergétique que le cas $S_b = 1/2$.

En comparant les trois figures, décrivant les états localisés des spins au voisinage du défaut dépôt atomique, nous concluons que les énergies des modes localisés et l'élargissement des bandes séparant les branches sont proportionnels au durcissement de l'intensité du spin S_b .

En conclusion, l'introduction d'une perturbation dans un système parfait entraine essentiellement la perte de la symétrie de la structure. Cette symétrie affecte peu les effets des parties de volume ou loin de défaut. Par contre, elle marque les phénomènes du défaut.

Dans le calcul des états localisés des spins, on a remarqué qu'il est possible, pour l'interface (due à la substitution atomique) et le défaut dépôt atomique sur une facette de la structure, de supporter que trois modes localisés au voisinage de la zone assurant la jonction entre les deux sous systèmes semi-infinis à forme tubulaire. Dans le premier défaut, on a un seul mode purement optique dans le cas d'un couplage fort à l'interface, et les deux autres modes sont acoustique (couplage faible). Les spectres dynamiques, des ondes de spin au niveau de la zone nanocontact engendrée par un défaut lacunaire, subit des bouleversements avec l'apparition de plusieurs modes localisés, qui sont acoustique et optique au niveau de la zone nanostructurée.

En résumé, nous avons présenté un modèle de calcul des propriétés de transport cohérent de magnons via des défauts atomiques dans des systèmes tubulaires quasi-1D. L'objectif est de donner et de comprendre la relation entre les transmissions totales de magnons en présence des défauts localisés. Il est aussi intéressant de noter que dans de récentes références [2,24-27] concernant la brisure de symétrie magnétique aux points de jonction, la plupart de leurs propriétés dérivent des résonances des états localisés dans le domaine perturbé.

Références

- [1] O. Nafa, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou(2010)
- [2] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2007)
- [3] F. D’Orazio, F. Lucari, G. Carlotti, G. Gubbiotti, M. Carbucicchio, G. Ruggiero, J. Mag. Mat.226-230, 1767(2001)
- [4] R. E. De Wames and T. Wolfram, Phys. Rev. Vol. 185, 2 (1969)
- [5] R. Chadli, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004)
- [6] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [7] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, Ph. Lambin, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 65, 174308 (2002)
- [8] H. Al-Wahsh, A. Akjouj, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, L. Doberzenski, Phys. Rev.B59, 8709 (1999)
- [9] A. Fellay. *Travail Pratique de Diplôme d’Ingénieur Physicien*. Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, (1995)
- [10] M. Belhadi. Thèse de doctorat d’état, Université M. Mammeri de TiziOuzou(2000)
- [11] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovvet, A. Khater Phys. Rev. B55, 1707 (1997)
- [12] R. Landauer, J. Phys.: Condens. Matter 1, 8099(1989)
- [13] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam, Solid. State. Com., 76, 437(1990)
- [14] M. Belhadi, A. Khater, Surf. Rev. Let.11, 99(2004)
- [15] R. Lai, S. A. Kiselev, and A. J. Sievers. Phys. Rev. B 56, 9 (1997)
- [16] P. Böni, B. Roessli, D. Görlitz and J. Kötzler, Phys. Rev. B 65, 144434 (2002)
- [17] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solide state Phys. 20, 4725 (1987)
- [18] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. Vol. 155, 3 (1967)
- [19] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila,S.d’Addato and N. Auby,J. Phys.C : Sol. state. Phys.21, 2113 (1988)
- [20] J. Szeftel, and S. Lehwald. Surf. Sci.143, 11 (1984)
- [21] R. F. Wallis, A. A. Maradudin, Solid.State. Com., 5, 89 (1967)
- [22] C. Kittel, *Introduction à la physique de l’état solide*, Dunod Ed., 5^{ème} édition (1995)
- [23] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [24] A. N. Chantis, K. D. Belashchenko, E. Y. Tsymbal, M. Van Schilfgaarde, Phys. Rev. Lett. 98, 046601 (2007)
- [13] J. D. Burton, R. F. Sabirianov, J. P. Velov, O. N. Mryasov, E. Y. Tsymbal to be published, arxiv.org/pdf/cond-mat/07033454
- [25] K. I. Bolotin, F. Kuemmeth, A. N. Pasupathy, D. C. Ralph, Nano Lett. 6, 123 (2005)
- [26] A. V. Khavalkovskii, K. A. Zvezdin, A. K. Zvezdin, Microelectronic engineering 81, 336 (2005)
- [27] M. Viret et al Phys. Rev. B 66, 220401 (2002)

Chapitre IV

DENSITES SPECTRALES ET DENSITES D'ETATS MAGNONIQUES

IV.1/ Introduction

La matrice dynamique M_d d'un système constitue l'outil de base pour l'étude des excitations élémentaires en général ; et la description du mouvement de précession des spins dans le cas des magnons au voisinage des zones perturbées, en volume dans le cas des systèmes tridimensionnels, et dans la zone parfaite dans le cas des systèmes à dimensions réduites. Ladite matrice peut être utilisée aussi, pour calculer certaines grandeurs physiques, comme les densités spectrales et les densités d'états [1-2].

Le moyen le plus approprié et direct pour les déterminer est l'opérateur de Green associé à la méthode de raccordement [2-4]. Cet opérateur est obtenu à partir de la matrice dynamique du système étudié [5-7]. Pour le calcul de la forme explicite des différents éléments consulter l'annexe C.

IV.2. Densités magnoniques

IV.2.1/ Méthode de calcul

Beaucoup de propriétés physiques intéressantes, induites par les excitations élémentaires, sont obtenues à travers un calcul de densité d'état $M_d(\Omega)$, définie d'une manière que la quantité $M_d(\Omega)d\Omega$ soit le nombre d'états d'énergies compris entre Ω et $(\Omega+d\Omega)$. Dans la limite thermodynamique, $M_d(\Omega)$ est considérée comme étant une fonction continue. Nous pouvons faire un calcul de densité d'états de magnons (DOS) au voisinage d'une inhomogénéité magnétique en utilisant un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de Green combiné à la méthode de raccordement [8-10].

Pour cela il faut tout d'abord calculer les densités spectrales, et le moyen le plus direct pour avoir ces dernières est d'utiliser l'opérateur de Green, qui peut être exprimé d'une manière très compacte, en l'associant la méthode de raccordement [9-13], sous la forme suivante

$$G(\varphi_y, \Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - M_S(\varphi_y, \{Z\}, \gamma)]^{-1} \quad (\text{IV.1})$$

La matrice des densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la direction du défaut magnétique est alors donnée par [4-6] :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(p,p')}(\varphi_y, \Omega) = \Omega \sum_m L_{\alpha m}^p \cdot L_{\beta m}^{p'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) \quad (\text{IV.2})$$

Où p et p' représentent deux sites de spin différents, α et β donnent les différentes directions cartésiennes, et $L_{\alpha m}^p$ la composante α du vecteur d'amplitude de précession du vecteur de spin p , pour la branche d'énergie Ω_m .

La densité d'états qui correspond à la somme sur φ_y de la trace des matrices de densités spectrales peut alors s'écrire comme :

$$Md(\Omega) = \sum_{\varphi_y} \sum_{p,\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{(p,p)}(\varphi_y, \Omega) = -\frac{\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_y} \sum_{p,\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\text{Im} G_{\alpha\beta}^{pp}(\varphi_y, \Omega + i\varepsilon)] \quad (\text{IV.3})$$

IV.2.3/ Résultats obtenus

Nous avons tracé les densités d'états magnoniques (DOS) pour trois valeurs différentes de γ (0.9, 1.0 et 1.1) correspondant à l'adoucissement, homogénéité et durcissement des intégrales d'échanges dans les zones perturbés. Nous avons tenu compte aussi de la variation des intensités des vecteurs du spin dans le cas de la substitution et du dépôt atomiques.

Les courbes de (DOS) pour les trois types de défauts, examinés au chapitre III, sont représentées sur les figures ci-dessous :

- 1) Substitution de deux atomes ;
Sur les figures (IV.1.1), (IV.1.2), et (IV.1.3).
- 2) Présence de deux lacunes ;
Sur la figure (IV.2.1).
- 3) Dépôt de deux atomes.
Sur les figures (IV.3.1-3), (IV.3.2), (IV.3.3).

1) Densité d'états magnonique pour le défaut substitution

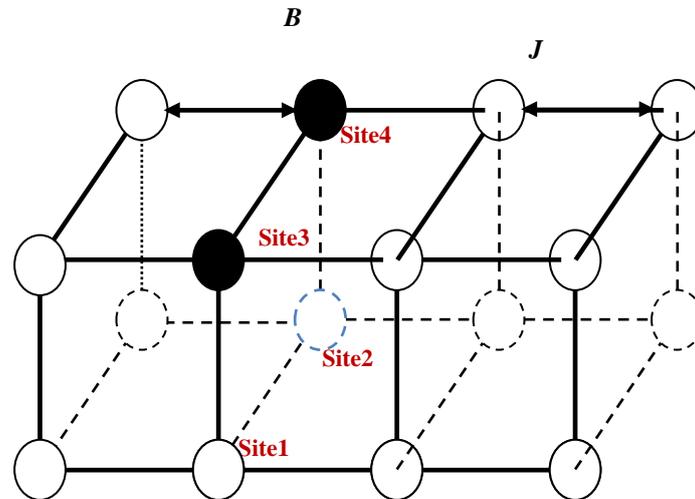


Figure (IV.1) : Représentation des sites irréductibles dans le cas du défaut substitution de deux sites atomiques par un autre type d'atome.

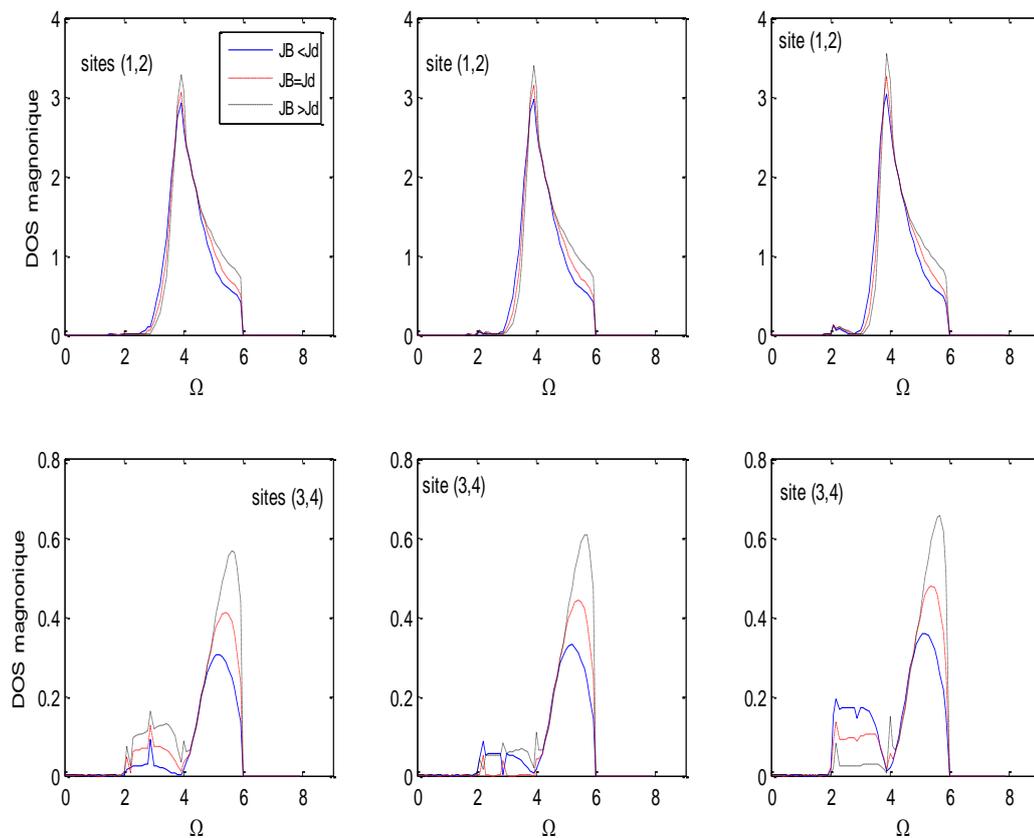


Figure (IV.1.1) : DOS dans le cas du défaut de substitution de deux atomes pour $S_b = 1/2$ de tous les sites irréductibles pour trois valeurs de γ .

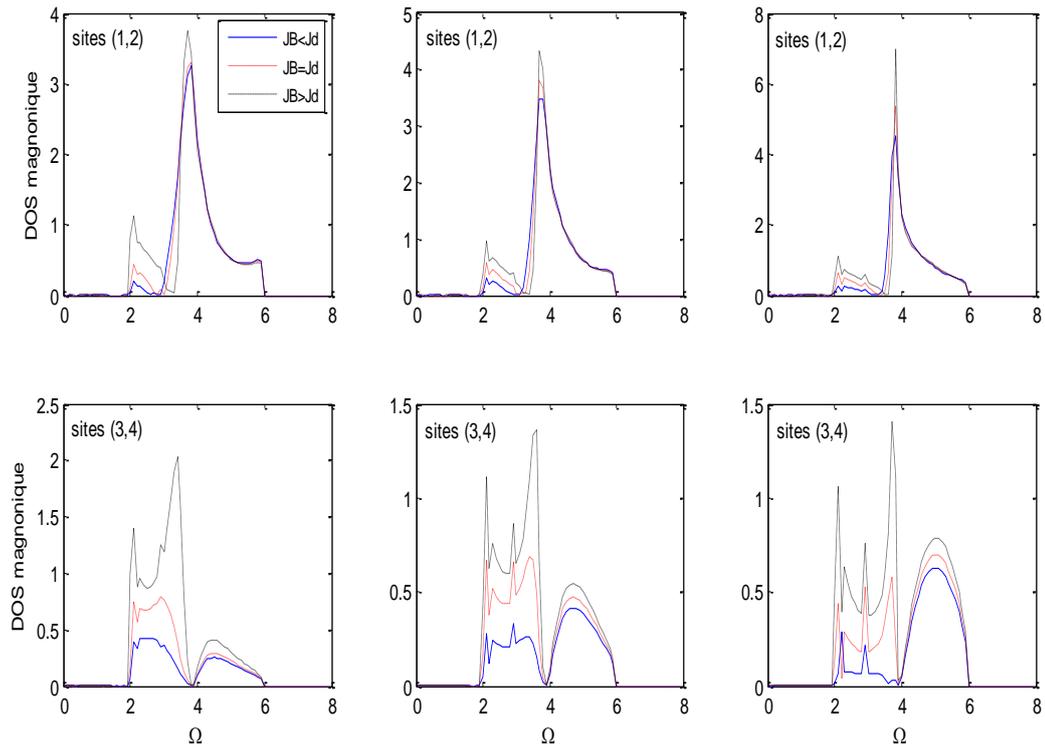


Figure (IV.1.2) : DOS magnonique dans le cas du défaut de substitution de deux atomes pour $S_b = 1.0$ de tous les sites irréductibles pour trois valeurs de γ .

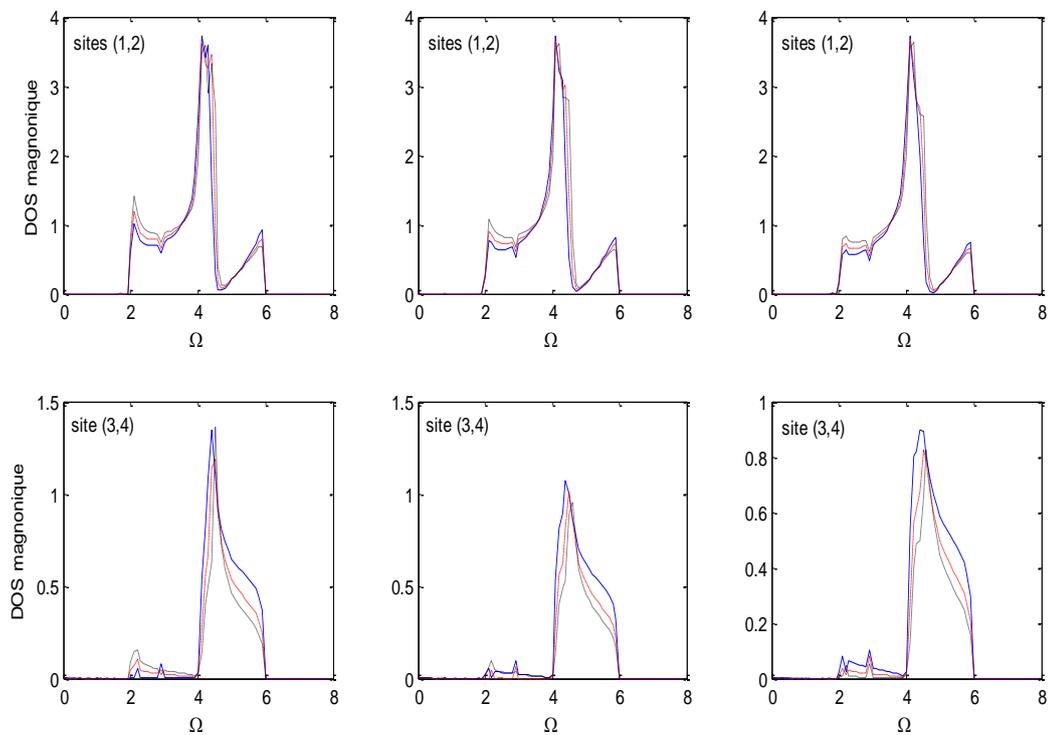


Figure (IV.1.3) : DOS magnonique dans le cas du défaut de substitution de deux atomes pour $S_b = 2.0$ de tous les sites irréductibles pour trois valeurs de γ .

2) *Densité d'états magnonique pour le défaut lacunaire*

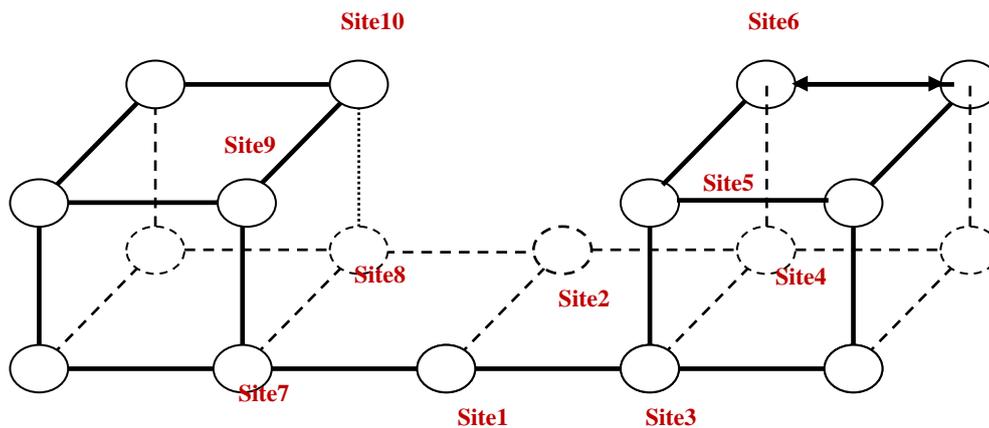


Figure (IV.2) : Représentation des sites irréductibles dans le cas du défaut lacunaire présent dans la structure tubulaire.

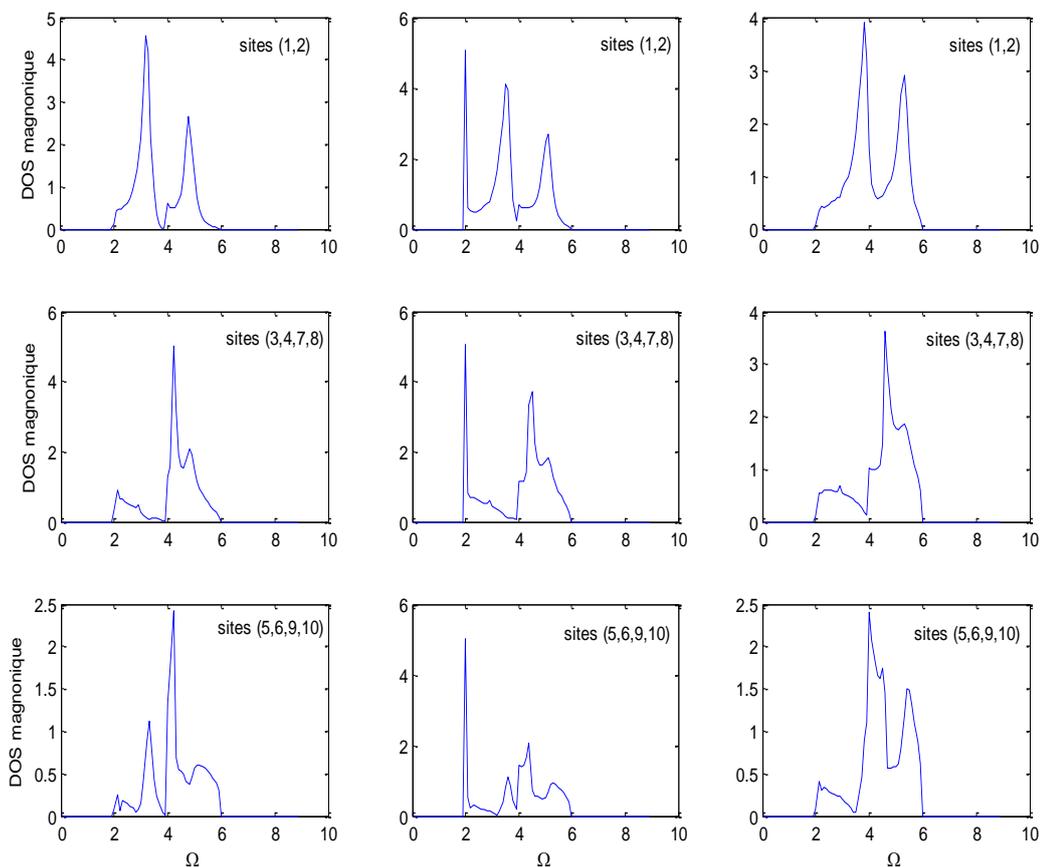


Figure (IV.2.1) : DOS dans le cas du défaut lacunaire de tous les sites irréductibles pour les trois valeurs de γ .

3) Densité d'états magnonique pour le dépôt d'atomes

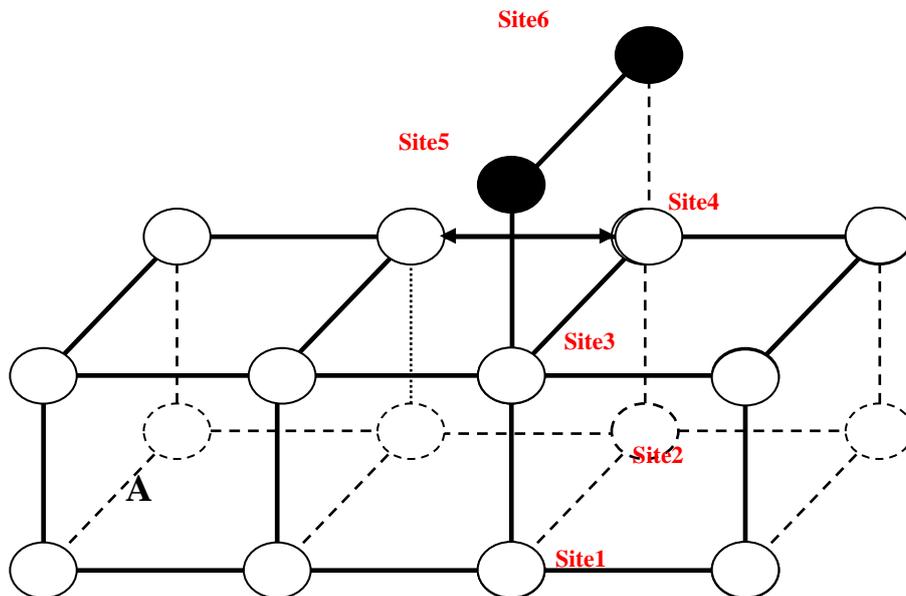


Figure (IV.3) : Représentation des sites irréductible dans le cas du défaut de dépôt de deux atome sur une facette de la structure tabulaire.

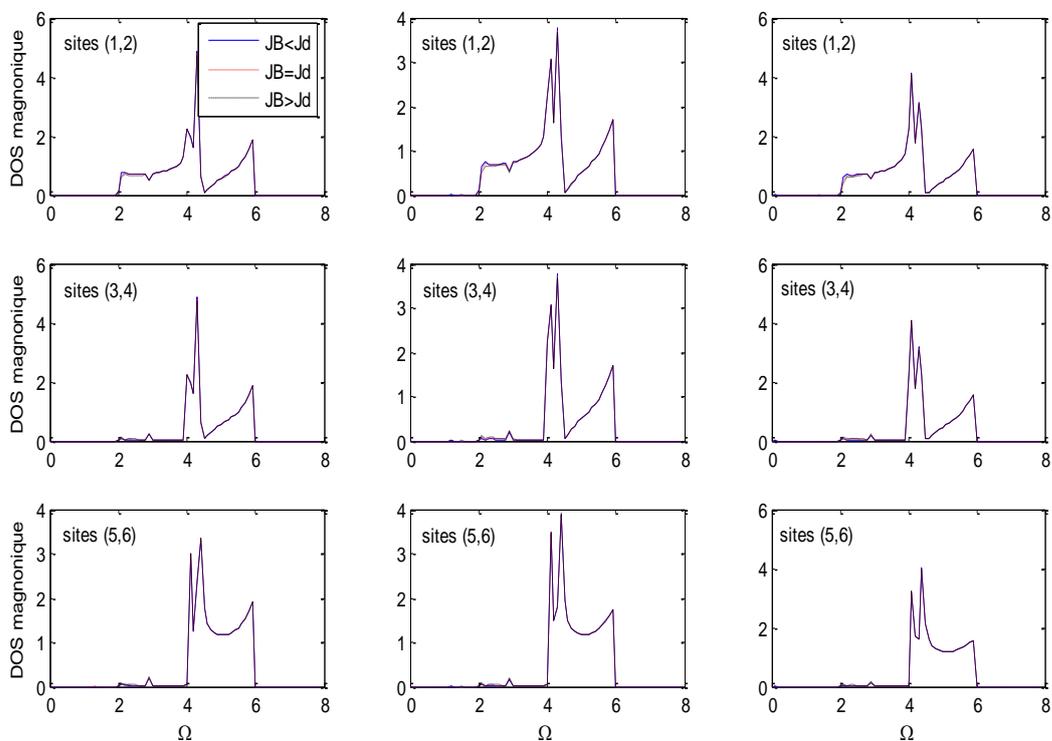


Figure (IV.3.1) : DOS dans le cas du défaut de dépôt atomique pour $S_b = 1/2$ de tous les sites irréductibles pour les trois valeurs de γ .

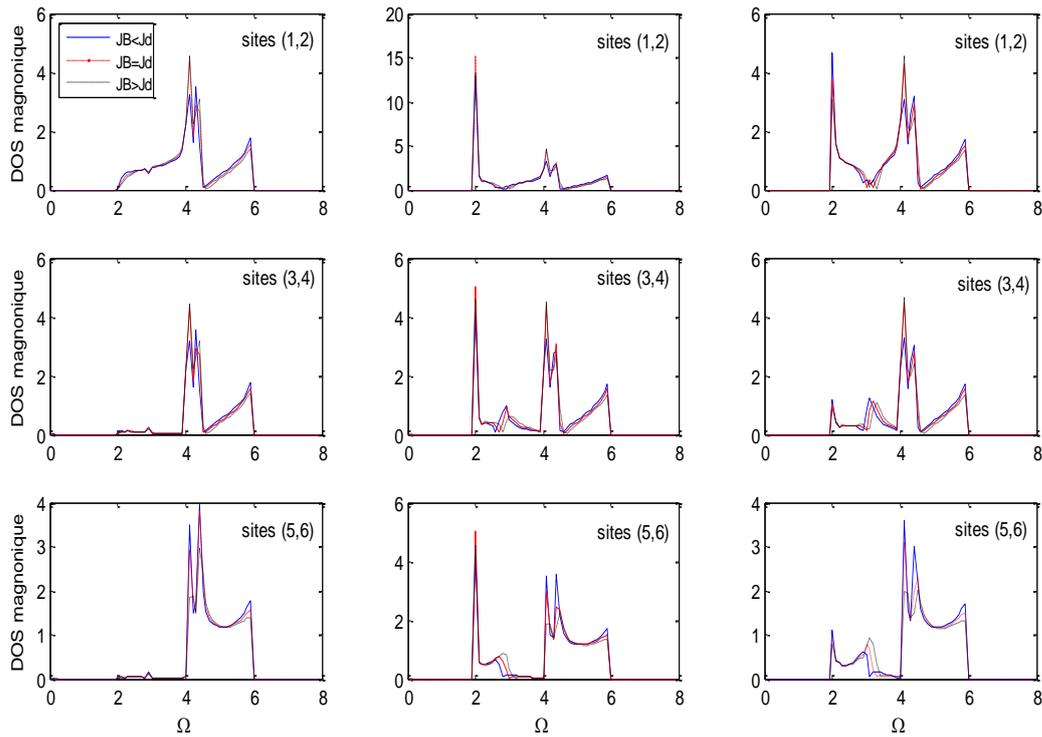


Figure (IV.3.2) : DOS magnonique dans le cas du défaut de dépôt atomique pour $S_b = 1$ de tous les sites irréductibles pour les trois valeurs de γ .

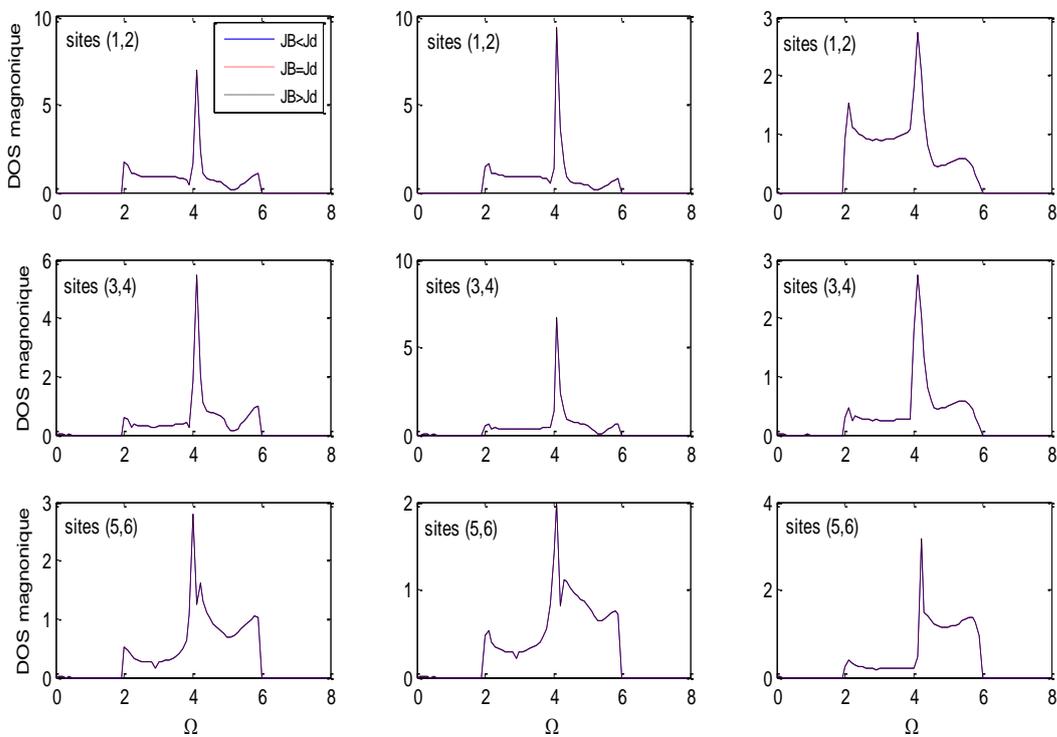


Figure (IV.3.3) : DOS dans le cas du défaut de dépôt atomique pour $S_b = 2$ de tous les sites irréductibles pour les trois valeurs de γ .

Discussion des résultats

Le calcul numérique est effectué pour les trois types de défauts atomiques présents dans de la structure à forme tubulaire quasi-1D examinée dans ce travail, qui sont:

- (1) défaut de substitution (présence de deux atomes de différente nature)
- (2) défaut lacunaire (présence de deux lacunes atomiques)
- (3) dépôt atomique (dépôt de deux atomes sur la structure tubulaire).

Pour chaque configuration, nous avons analysé trois possibilités du choix de l'environnement magnétique dans le domaine propre de la zone perturbée par rapport à la valeur de l'intégrale d'échange la structure tubulaire parfaite. Celles-ci sont respectivement : (i) $\gamma = 0.9$, (ii) $\gamma = 1.0$, et (iii) $\gamma = 1.1$. (De l'adoucissement jusqu'au durcissement en passant par l'homogénéité des constantes magnétiques).

En plus de ces variations, nous avons étudié l'influence de l'intensité du vecteur spin substitué déposer dans le cas des défauts (1 et 3). Le calcul a été effectué pour trois choix de différentes valeurs de spin, qui sont respectivement : $S_b = 1/2$, $S_b = 1$ et $S_b = 2$.

Les densités d'états magnoniques sont calculées numériquement pour les différents sites de spins irréductibles (spins situés dans la zone défaut), et sont données en unité arbitraire, en fonction de la fréquence normalisée Ω , dans la zone de Brillouin.

Les résultats de la densité d'état magnonique (DOS) sont présentés sur les trois figures (IV.1.1), (IV.1.2), et (IV.1.3) pour les sites irréductibles du premier défaut de substitution ; sur la figure (IV.2.1) pour les sites du nanocontact du second défaut, et sur les trois figures (IV.3.1), (IV.3.2) et (IV.3.3) concernant les sites situés sur l'interface contenant le dépôt atomique.

L'ensemble des spectres de (DOS) montrent des pics et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence $[0 - 8.00]$, pour l'ensemble des valeurs de γ et de S_b considérées dans ce travail. Les résultats numériques sont rangés en figures et chaque figure est composée de lignes et de colonnes. Les figures donnent l'influence du paramètre S_b , les lignes donnent l'information sur les DOS de chaque sites atomique localisé dans la zone perturbée et en dernier les colonnes décrivent la variation de γ , les cas notés (i), (ii) et (iii), allant de l'adoucissement à droite jusqu'au durcissement à gauche. Sur les courbes se rapportant au premier et au troisième type de défaut magnétique, nous avons examiné trois possibilités de l'échange magnétique J_B , qui sont indiquées en légende ($J_B \langle J_d$, $J_B = J_d$, et $J_B \rangle J_d$).

Les courbes se rapportant au deuxième type de défaut magnétique (cas de présence lacunes dans la structure tubulaire) présentent une richesse en pics (plus importante) que les deux autres types de défauts. Ceci est justifié, car le nombre d'états localisés dans le deuxième cas est plus grand que les deux autres.

Comme prévu, pour les spins des emplacements (sites) symétriques, leurs courbes de DOS sont identiques dans les trois types de configurations de défauts.

Dans le premier type de configuration de défaut (substitution d'atomes), la comparaison entre les courbes des sites indiqués, sur chaque figure (tracée sur (IV.1.1), (IV.1.2), et (IV.1.3)), montre que l'amplitude de précession des sites (1) et (2) est plus grande par rapport aux sites substitués. Nous remarquons aussi que, à la position de fréquence $\Omega \approx 4$, les sites (1,2) ont leur amplitude maximale, tandis que les deux autres sites (3,4) sont stationnaires, par conséquent, on déduit qu'à cette fréquence le mouvement précessionnel des spins cités est en déphasage de $\pi/4$.

L'analyse des courbes donne une autre information capitale sur le faible décalage des positions des pics vers les basses fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique (lorsque γ augmente) pour $S_b = 1/2$, les positions demeurent fixes pour $S_b = 1$, mais on constate un décalage vers les hautes fréquences d'une façon claire dans le cas de $S_b = 2$.

Concernant la variation de J_B , on note une influence uniquement au niveau des amplitudes (hauteurs) des pics et on constate une faible sensibilité des sites (1,2) à la variation dans le cas où $S_b = 1/2$. Notons aussi que les spectres de DOS magnoniques sont nuls pour les quatre sites irréductibles dans les intervalles de fréquences $\Omega \in [0, 2]$ et $\Omega \in [6, 8]$.

Dans le deuxième type de configuration de défaut (présence de lacunes), tracé sur la figure (IV.2.1), la comparaison entre les courbes des sites indiqués, montre que leurs positions se déplacent vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique dans le domaine propre du nanocontact engendré par les lacunes. Les spins des coins présentent une amplitude inférieure par rapport aux autres et ce à cause de leur position et la réduction du nombre de voisins.

Notons aussi que les spectres de DOS magnoniques sont nuls pour l'ensemble des dix sites irréductibles de la zone nanocontact dans les intervalles de fréquences $\Omega \in [0, 2]$ et $\Omega \in [6, 8]$. Cette situation confirme l'importance des états localisés du domaine perturbé et son influence sur les spectres de DOS.

Dans le troisième cas de défaut (dépôt atomique), les spectres de DOS magnonique sont donnés sur les figures (IV.3.1), (IV.3.2) et (IV.3.3). Ils sont fortement dépendant des variations des deux paramètres γ et S_b et sont insensibles à la variation de J_B .

En effet, dans les cas où S_b prend les valeurs $\frac{1}{2}$ et 2, les courbes sont identiques et se superposent, et dans la troisième possibilité de $S_b = 1$, nous observons une très faible variation de la hauteur des pics mais sans aucune incidence sur les intervalles de fréquences.

Tous les sites de la zone perturbée présentent une fréquence de résonance à la fréquence $\Omega = 4$, quelque soit les paramètres employés. Ceci s'explique par l'excitation de plusieurs modes propageant simultanément à cette fréquence.

Notons une similitude avec les spectres de DOS magnoniques observés dans les deux défauts précédents (substitution et lacunes). Ils sont nuls pour les six sites irréductibles dans les intervalles de fréquences $\Omega \in [0, 2]$ et $\Omega \in [6, 8]$.

On remarque aussi, les spins des sites (3, 4, 5,6) ne sont pas excités à très basses fréquences, leurs spectres de DOS sont quasi-nuls dans l'intervalle $\Omega \in [0, 4]$ pour des petites valeurs de S_b ($S_b = \frac{1}{2}$).

En conclusion, nous avons présenté des modèles simples pour l'étude des spectres de densités d'états magnoniques locales des spins (DOS), pour les sites irréductibles du domaine nanostructurés dans une structure à forme tubulaire quasi-1D, composée de quatre chaînes à configuration 3D et parallèles deux à deux. L'analyse des spectres de DOS locales des zones perturbées renseigne sur l'impact des paramètres caractérisant le système et démontre le rôle central qui peut être joué par les sites situés au cœur du défaut sur la dynamique des systèmes tubulaires en présence d'homogénéités.

Il peut également servir pour l'étude des chaînes granulaires ou structures à dimensions réduites construites d'une façon analogue. Il faut noter également que les propriétés magnétiques et la dispersion de magnons pourrait changer si la forme géométrique du défaut change.

Références

- [1] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323, 198 (1995)
- [2] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995)
- [3] A. Virlovet, A. Khater, Y. Pennec, K. Maschke, J. Phys.: Cond. Matter 8,7589 (1996)
- [4] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2007)
- [5] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [6] R. Chadli, mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004)
- [7] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001)
- [8] Niu-Niu Chen and M. G. Cottam Phys. Rev. B. 44, 14 (1991)
- [9] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323 198 (1995)
- [10] J. B. Salzberg, L. M. Falicov. Phys. Rev. B15, 11 (1977)
- [11] H. Grimech et A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995)
- [12] M. Belhadi. Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou(2000)
- [13] C. Kittel, *Introduction à la physique de l'état solide*, Dunod Ed., 5^{ème} édition (1995)

CONCLUSION GENERALE

Nous avons développé une approche théorique qui permet de traiter la diffusion d'ondes de spin dans les systèmes de basses dimensions présentant des défauts de structure. L'investigation des ondes diffusées s'est effectuée en résolvant directement l'équation du mouvement des spins avec des conditions aux limites fixées au préalable. Bien que la méthode présentée dérive de travaux menés sur les guides d'ondes de spin, le cas des ondes de précession est beaucoup plus compliqué, la différence essentielle provient du fait que les fonctions d'ondes dans l'équation de Schrödinger sont des scalaires complexes, alors que les fonctions d'onde précessionnelles sont décrits, quand à elle par des vecteurs complexes.

L'influence de la géométrie des structures de dimensions réduites sur les phénomènes de transport cohérent de magnons est étudiée en utilisant la technique de raccordement, et ce pour les différents paramètres de la zone caractérisant le domaine perturbé (intégrale d'échange) par rapport aux zones parfaites. La méthode de raccordement s'applique à l'étude de la dynamique des systèmes, quelque soit leur taille, contenant des défauts variés. Par ailleurs, cette technique combinée aux fonctions de Green permet, aussi de calculer les densités spectrales et densités d'états locales. Les résultats obtenus, concernant les densités spectrales et les densités d'états magnonique des systèmes étudiés, sont comparables à ceux qui se rattachent aux phénomènes électroniques des systèmes perturbés de basses dimensions.

Nous avons relevé l'impact d'un défaut localisé (lacunes, substitution, dépôt atomique) sur les états localisés de spins, le transport magnonique et les spectres de transmission totale des ondes de spins d'un système à forme tubulaire, composé de quatre chaînes atomiques disposées deux à deux. Ceci a permis de mettre en évidence un certain nombre de phénomènes intéressants tels que l'interaction des états localisés créés par les défauts et les modes propageants du continuum.

Nous avons montré, aussi que la brisure de symétrie, engendrée par l'existence du défaut, laisse une empreinte caractéristique dans les courbes de transmittance magnonique. Autrement dit, les spectres obtenus par des expériences de diffusion à travers un échantillon contiennent une information sur la structure détaillée du système. Les structures les plus remarquables dans les courbes de totale transmission ont la forme de résonances de type Fano, qui sont une conséquence de l'interaction entre un continuum et un mode résonant créé par une inhomogénéité.

La maîtrise parfaite de la nouvelle matière va contribuer à la fabrication et la production de matériaux améliorés, plus légers et de caractéristiques plus fiables. Notons aussi que la diffusion d'ondes de spins est complexe, et cela est dû à la possibilité de couplage entre les différents modes dus aux nanostructures, du fait du caractère vectoriel du champ de déplacement des magnons.

PERSPECTIVES

Concernant les perspectives offertes par ce travail, nous citons :

- l'étude de l'influence de la combinaison de plusieurs nanostructures en même temps (interstitiels, lacunes, dislocations...), dans les films minces métalliques avec différentes épaisseurs, sur la dynamique des spins et les excitations magnétiques à couplage ferromagnétique, antiferromagnétique ou les deux en même temps.
- application de la méthode de raccordement à des températures supérieures à (0K) et déterminer le transport thermique et la chaleur spécifique dans des systèmes réels de dimensionnalité réduite.
- étudier les nanomatériaux dans leur environnement réel (tenir compte des interactions avec le substrat).
- en fin, il est à espérer que la procédure puisse se développer afin de mieux approcher les grandeurs thermodynamique et ouvrir de nouveaux champs d'application dans d'autres domaines (métallurgie, semi-conducteurs, physique des couches minces et de l'interface).

Annexe A

CALCUL DES VITESSES DE GROUPE

La vitesse de groupe V_g est définie seulement pour des vecteurs d'ondes q réels.

$$\vec{V}_g = \vec{\nabla}_q \omega \quad (\text{A.1})$$

Sinon, on impose $V_g = 0$.

Pour calculer cette dérivée, on peut appliquer les routines standards existantes, basées sur les différences finies. Nous utiliserons cependant une méthode simple.

On part du problème du guide d'ondes parfait, l'équation du mouvement des atomes et le mouvement de précession des spins, permettent d'écrire respectivement :

$$M_d(q)\vec{u} = -\omega\vec{u} \quad (\text{A.2})$$

A q fixé, on trouve les valeurs propres ω_v avec les vecteurs propres correspondants.

La similitude formelle entre l'équation (A.2) et l'équation de Schrödinger stationnaire,

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{A.3})$$

nous pousse à tenter une approche que nous appellerons perturbative, puisqu'elle est calquée sur le traitement des perturbations indépendantes du temps en mécanique quantique.

Supposons connus tous les éléments des équations (A.2)

$$M_d(q_0)\vec{u}(q_0) = -\omega(q_0)\vec{u}(q_0) \quad (\text{A.4})$$

Le rôle de la perturbation est joué par un accroissement infinitésimal Δ tel que :

$$q = q_0 + \Delta q \quad (\text{A.5})$$

Si l'on se limite au premier ordre, on considère que le vecteur propre est constant.

$$\vec{u}(q) = \vec{u}(q_0) \quad (\text{A.6})$$

Par contre :

$$M_d(q) = M_d(q_0) + \Delta q \frac{\partial M_d}{\partial q} \quad (\text{A.7})$$

Et

$$\omega(q) = \omega(q_0) + \Delta q \frac{\partial \omega}{\partial q} \quad (\text{A.8})$$

Pour les magnons, on réécrit l'équation (A.2) en tenant compte des approximations, ce qui donne :

$$\begin{aligned} & \left[M_d(q_0) + \omega(q_0) + \Delta q \cdot \frac{\partial M_d}{\partial q} + \Delta q \cdot \frac{\partial \omega}{\partial q} \right] \vec{u}(q_0) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial M_d}{\partial q} \vec{u} = - \frac{\partial \omega}{\partial q} \vec{u} \\ \Rightarrow & \vec{u}^t \frac{\partial M_d}{\partial q} \vec{u} = - \frac{\partial \omega}{\partial q} \vec{u}^t \vec{u} = - \frac{\partial \omega}{\partial q} \\ \Rightarrow & \frac{\partial \omega}{\partial q} = - \vec{u}^t \frac{\partial M_d}{\partial q} \vec{u} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

La matrice M_d étant connue, il est possible d'en faire la dérivée analytique. Les équations (A.9) permettent alors de calculer les vitesses de groupe.

Annexe B

**FORMES EXPLICITES DES MATRICES ISSUES
D'AUGMENTATION DE BASE**

La matrice dynamique de la structure tubulaire parfaite quasi-1D, formée par quatre chaînes disposées parallèlement deux à deux est :

$$[M_d] = \begin{bmatrix} \Omega - 4J + J(Z+1/Z) & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \Omega - 4J + J(Z+1/Z) & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \Omega - 4J + J(Z+1/Z) & 1 \\ 0 & 1 & 1 & \Omega - 4J + J(Z+1/Z) \end{bmatrix}$$

La matrice C_1

$$[C_1] = \begin{bmatrix} \Omega - 4J & J & J & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ J & \Omega - 4J & 0 & J & 0 & J & 0 & 0 \\ J & 0 & \Omega - 4J & J & 0 & 0 & J & 0 \\ 0 & J & J & \Omega - 4J & 0 & 0 & 0 & J \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La matrice C_2

$$[C_2] = \begin{bmatrix} J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Annexe C

LES ELEMENTS DE LA MATRICE DES FONCTIONS DE GREEN

Dans notre travail, l'opérateur $G(\omega)$ est obtenu à partir de la matrice défaut M_d en suivant les étapes suivantes :

$$G(\omega) = [\omega I - M_d]^{-1} \quad (\text{C.1})$$

Pour expliciter les éléments des matrices M_d et $G(\omega)$, de rang f , nous choisissons la base des f

vecteurs $|e_n\rangle$ qu'on définit par : $|e_n\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \delta_{nm} \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{I} \\ \text{m} \\ \text{I} \end{matrix}$.

Soit : $\langle e_n | = \begin{pmatrix} \text{---} & \text{---}^m & \text{---} \\ \dots & \delta_{nm} & \dots \end{pmatrix}$ avec $n, m = 1, \dots, f$.

Dans le cas des magnons $f = N$.

Désignons par $\langle e_n | e_n \rangle$ le produit scalaire des vecteurs $|e_n\rangle$ et $\langle e_n |$:

$$\langle e_n | e_n \rangle = \sum_i \delta_{ni} \delta_{im}.$$

On en déduit la relation d'orthonormalité des vecteurs $|e_n\rangle$:

$$\langle e_n | e_n \rangle = \delta_{nm} \quad (\text{C.2})$$

Et l'équation suivante de fermeture :

$$I = \sum_k |e_k\rangle \langle e_k| \quad (\text{C.3})$$

En effet, en utilisant (C.2), les éléments de $\sum_k |e_k\rangle\langle e_k|$ dans la base des vecteurs $|e_n\rangle$ s'écrivent :

$$\langle e_n | \left[\sum_k |e_k\rangle\langle e_k| \right] | e_m \rangle = \sum_k \langle e_n | e_k \rangle \langle e_k | e_m \rangle = \sum_k \delta_{nk} \delta_{km} = \delta_{nm}.$$

Soit $|u_p\rangle$ ($p = 1, \dots, f$), les vecteurs propres de la matrice dynamique M_d , et ω_p les valeurs propres correspondantes. Nous considérons par la suite que la relation est normalisée :

$$\langle u_p | u_p \rangle = 1$$

D'après la définition de ces vecteurs, on peut écrire :

$$\langle u_{p'} | M_d | u_p \rangle = \omega_p \langle u_{p'} | u_p \rangle$$

Comme M_d est diagonale dans la base des vecteurs propres, le produit scalaire $\langle u_{p'} | u_p \rangle$ est nul si $|u_p\rangle \neq |u_{p'}\rangle$. D'où l'égalité :

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta_{pp'} \tag{C.4}$$

1- Calcul des éléments de $G(\omega)$

Dans le but d'exprimer les éléments $\langle e_n | G(\omega) | e_m \rangle$ de la matrice $G(\omega)$ en fonction des valeurs et des vecteurs propres de la matrice M_d , nous introduisons la matrice B de passage entre les deux bases $(|u_p\rangle)$ et $(|e_n\rangle)$:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \mathbf{B} \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{C.5a}$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{C.5b})$$

D'après (C.5) : un vecteur propre $|u_p\rangle$ est une combinaison linéaire des f vecteurs $|e_n\rangle$

$$|u_p\rangle = \sum_{n=1}^S \langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle |e_n\rangle \quad (\text{C.6})$$

Où l'élément $\langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle$ de la matrice \mathbf{B} représente la projection du vecteur propre $|u_p\rangle$ sur le vecteur $|e_n\rangle$.

En effet, d'après (C.6) :

$$\langle e_i | u_p \rangle = \sum_{n=1}^N \langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle \langle e_k | e_n \rangle = \sum_{n=1}^N \langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle \delta_{kn}$$

D'où l'équation :

$$\langle e_k | u_p \rangle = \langle e_p | \mathbf{B} | e_k \rangle. \quad (\text{C.7})$$

Pour montrer que la matrice \mathbf{B} est unitaire ($\mathbf{B}^+ = \mathbf{B}^{-1}$), nous allons exprimer, en utilisant (C.3) et (C.6), le produit scalaire $\langle u_p | u_p \rangle$ en fonction de \mathbf{B} et \mathbf{B}^+ :

$$\langle u_p | u_p \rangle = \sum_n \sum_n \langle e_n | \mathbf{B}^+ | e_p \rangle \langle e_p | \mathbf{B} | e_m \rangle \delta_{mn}$$

$$\Rightarrow \langle u_p | u_p \rangle = \sum_n \langle e_p | \mathbf{B} | e_m \rangle \langle e_m | \mathbf{B}^+ | e_p \rangle$$

$$\langle u_p | u_p \rangle = \langle e_p | \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^+ | e_p \rangle.$$

D'après (C.4), on obtient :

$$\langle e_p | \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^+ | e_p \rangle = \delta_{pp} \quad (\text{C.8})$$

On en déduit que la matrice \mathbf{B} , définie par (C.5), vérifie la relation :

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^+ = \mathbf{I} \quad (\text{C.9})$$

$$\Rightarrow \mathbf{B}^+ = \mathbf{B}^{-1}$$

Cette propriété de la matrice \mathbf{B} permet d'établir, pour la base propre, la relation de fermeture qui s'écrit :

$$\mathbf{I} = \sum_p |u_p\rangle \langle u_p|. \quad (\text{C.10})$$

En effet, d'après (C.7) et (C.8), on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle e_n | \left[\sum_p |u_p\rangle \langle u_p| \right] | e_m \rangle &= \sum_p \langle e_n | u_p \rangle \langle u_p | e_m \rangle \\ &= \sum_p \langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle \langle e_p | \mathbf{B} | e_m \rangle \\ &= \sum_p \langle e_m | \mathbf{B}^+ | e_p \rangle \langle e_p | \mathbf{B} | e_n \rangle \\ &= \langle e_m | \mathbf{B}^+ \mathbf{B} | e_n \rangle \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

Soit L la matrice diagonale, dont les éléments sont donnés par :

$$\langle e_n | L | e_m \rangle = \omega \delta_{nm} \quad (\text{C.11})$$

En utilisant l'équation (C.3), on explicite les éléments de la matrice $\mathbf{B}^+ \cdot L \cdot \mathbf{B}$ de la manière suivante :

$$\langle e_n | \mathbf{B}^+ L \mathbf{B} | e_m \rangle = \langle e_n | \mathbf{B}^+ L \mathbf{B} | e_m \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_i \sum_j \langle e_n | \mathbf{B}^+ | e_i \rangle \langle e_i | \mathbf{L} | e_j \rangle \langle e_j | \mathbf{B} | e_m \rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle e_i | \mathbf{B} | e_n \rangle^* \omega_i^2 \delta_{ij} \langle e_j | \mathbf{B} | e_m \rangle \\
&= \sum_i \omega_i^2 \langle e_i | \mathbf{B} | e_n \rangle^* \langle e_i | \mathbf{B} | e_m \rangle.
\end{aligned}$$

En utilisant (C.7), (C.9) et la définition des vecteurs $|u_p\rangle$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\langle e_n | \mathbf{B}^+ \mathbf{L} \mathbf{B} | e_m \rangle &= \sum \omega_i \langle e_m | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle \\
&= \sum \langle e_m | \mathbf{M}_d | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle \\
&= \langle e_m | \mathbf{M}_d | e_n \rangle
\end{aligned}$$

Ainsi, si la matrice \mathbf{M}_d est symétrique, elle vérifie :

$$\mathbf{M}_d = \mathbf{B}^+ . \mathbf{L} . \mathbf{B} \quad (\text{C.12})$$

D'après (C.1) et (C.10), la matrice $G(\omega^2)$ peut s'exprimer en fonction de \mathbf{B} , \mathbf{B}^+ et \mathbf{L} :

$$\begin{aligned}
G(\omega^2) &= [\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{D}]^{-1} \Rightarrow G(\omega^2) = [\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{B}^+ \mathbf{L} \mathbf{B}]^{-1} \\
&\Rightarrow G(\omega^2) = [\mathbf{B}^+ (\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{L}) \mathbf{B}]^{-1}.
\end{aligned}$$

$$\text{On en déduit : } G(\omega^2) = \mathbf{B}^+ (\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{B}. \quad (\text{C.13})$$

D'après (C.11), les éléments $\langle e_n | (\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{L})^{-1} | e_m \rangle$ de la matrice $(\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{L})^{-1}$ s'écrivent :

$$\langle e_n | (\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{L})^{-1} | e_m \rangle = \frac{\delta_{nm}}{(\omega^2 - \omega_n^2)}. \quad (\text{C.14})$$

En utilisant les équations (C.3), (C.13) et (C.14), les éléments de la matrice $G(\omega)$ peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle &= \sum_p \sum_{p'} \langle e_n | u_p \rangle \frac{\delta_{pp'}}{(\omega^2 - \omega_p^2)} \langle e_m | u_{p'} \rangle \\ \Rightarrow \langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle &= \sum_p \frac{\langle e_n | u_p \rangle \langle e_m | u_p \rangle}{(\omega^2 - \omega_p^2)}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

2. Densités spectrales

Densités magnoniques

Désignons par $\gamma(\omega)$ le spectre de fréquence (densités d'états) du système :

$$\gamma(\omega) = \sum_p \delta(\omega - \omega_p). \quad (\text{C.16})$$

$\gamma(\omega)$: représente le nombre d'états de spin dont la fréquence est égale à ω . Comme la matrice B est unitaire, $\gamma(\omega)$ peut être exprimée par les équations suivantes :

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum \gamma_n(\omega) \quad (\text{C.17})$$

Où $\gamma_n(\omega)$ est la densité spectrale définie par :

$$\gamma_n(\omega) = \sum_p \langle e_n | u_p \rangle \delta(\omega - \omega_p) \quad (\text{C.18})$$

$\gamma_n(\omega)$: représente physiquement la somme des carrés des amplitudes de précessions des spins excitées sur un site donné suivant une direction cartésienne, de tous les modes propres de fréquence $\omega_p = \omega$. En tenant compte du fait que :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon / \pi}{(\omega - \omega_p) + \varepsilon^2} = \delta(\omega - \omega_p) \quad (\text{C.19})$$

On trouve :

$$\gamma_n(\omega) = \frac{\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \quad (\text{C.20})$$

D'après (C.15), les valeurs propres ω_p de M_d représentent les pôles des éléments de l'opérateur $G(\omega)$.

Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire ε à la variable ω , ce qui donne :

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} \langle e_n | G(\omega + j\varepsilon) | e_n \rangle] \quad (\text{C.21})$$

L'opérateur de Green est obtenu à partir de la matrice carrée M_d (qui résulte du produit entre la matrice défaut et la matrice de raccordement).

La matrice de densité spectrale est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\Omega) = \Omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\Omega - \Omega_m) = \Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{ll'}(\Omega + i\varepsilon)]) \quad (\text{C.22})$$

Où : l et l' représentent deux sites atomiques différents, α et β les directions cartésiennes, et $P_{\alpha m}^l$: la composante α du vecteur déplacement de l'atome l dans le mode Ω_m .

La densité d'état correspond à la somme de la trace des matrices de densité spectrale, elle peut s'écrire comme :

$$N(\Omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{l,l'}(\Omega) = (-\Omega / \pi) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\alpha}^{ll'}(\Omega + i\varepsilon)]) \quad (\text{C.23})$$