

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA-BOUMERDES



Faculté des sciences

Thèse de Doctorat

Présentée par :

FERRAH Leila

En vue de l'obtention du diplôme de **DOCTORAT Science** en :

Filière : Physique

Spécialité : Physique des matériaux

TITRE

Excitation magnétiques et vibrations atomiques dans les films minces composites

Devant le jury composé de :

M ^f Tarek Guerfi	Professeur	U.M.B. Boumerdes	Président
M ^f Boualem Bourahla	Professeur	U.M.M. Tizi-Ouzou	Directeur de thèse
M ^f Salah Blizak	Professeur	U. M.B. M'Sila	Co-Directeur de thèse
M ^{me} Razika Tala-Ighil	Professeure	U.M. B. Boumerdes	Examinatrice
M ^{me} Ouahiba Nafa	MC/A	U.M.M. Tizi-Ouzou	Examinatrice
M ^{me} Nadia Boukherroub	MC/A	U.M.B. Boumerdes	Examinatrice

Année Universitaire 2022/2023

Remerciements

Cette thèse est le fruit d'une collaboration scientifique entre l'Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou et l'Université M. Bougara de Boumerdes. Elle est réalisée sous la direction conjointe des Professeurs B. Bourahla (Tizi-Ouzou) & Salah Blizak (de l'Université de M'Sila – initialement rattaché à l'Université de Boumerdes).

J'exprime ma reconnaissance à l'égard de mes encadreurs pour l'efficacité et la bienveillance avec laquelle ils m'ont constamment guidé et encouragé le long de la période de ma formation doctorale. J'ai été très marquée par leurs qualités professionnelles et humaines.

Je tiens à remercier vivement les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ma thèse.

- Monsieur Tarek Guerfi, Professeur à l'UMBB pour m'avoir fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de thèse.
- Les examinateurs : Professeure Razika Tala-Ighil (de l'UMBB), Docteure Ouahiba Nafa (de l'UMMTO) et Docteure Nadia Boukherroub (de l'UMBB) pour avoir acceptées de prendre part au jury de ma thèse.

Mes remerciements vont également aux chercheurs de LPCQ (de l'UMMTO) et les chercheurs de l'unité de recherche Matériaux, Procédés et Environnement (de l'UMBB), les thésards des deux Universités, mes amies, pour les différentes discussions enrichissantes, leurs encouragements, leurs suggestions, leurs conseils et surtout pour l'ambiance amicale. Je n'oublierai pas les bons moments que j'ai partagés avec eux.

Avant de clore, je présente un grand merci à tous les membres de ma famille (frères, sœurs et neveux et nièces) pour leurs encouragements et le soutien indéfectible.

Leila Ferrah

TABLE DES MATIERES

Introduction générale	3
Chapitre 1	
Excitations collectives de types phonons et magnons dans les couches minces	9
I) Introduction	10
II) Ondes élastiques	10
II.1) Propagation des ondes élastiques	11
II.2) Dynamique du réseau - Phonons	12
II.3) Equations du mouvement des phonons	13
II.4) Modes de vibration	13
III) Des magnons à la magnonique	14
III.1) Onde de spin et magnons	14
III.2) Réflexion & transmission d'ondes de spin	15
III.3) Magnétorésistance	16
III.4) La spintronique	17
III.5) La magnonique	18
VI) Les films minces	18
VI.1) Obtention de films minces	18
VI.2) Les interfaces cristallines	20
V) Conclusion	21
Références du chapitre 1	22
Chapitre 2	
Relations de dispersion des phonons et des magnons dans les multicouches composites	23
I) Introduction	24
II) Théorie et méthodes de calculs	24
III) Relation de dispersion des excitations élémentaires	27
III.1) Dispersion de magnons dans une multicouche composite ferromagnétique	27
III.1.1) Structure modèle	27
III.1.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique	28
III.1.3) Courbe de dispersion des magnons	30
III.1.4) Impact de l'anisotropie de surface sur la dispersion des magnons	33
III.1.5) Effet de l'intensité du spin sur la dispersion de magnon dans un film composite	35
III.2) Dispersion de phonons dans les multicouches composites	37
III.2.1) Structure modèle	38
III.2.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique	38
III.2.3) Relation de dispersion des phonons	41
III.2.4) Phonons acoustiques	43
III.2.5) Phonons optiques	44
IV) Vitesse du groupe	44
V) Les modes évanescents	47
VI) Conclusion	48
Références du chapitre 2	49
Chapitre 3	
Diffusion des ondes de spin et des ondes élastiques via les inhomogénéités structurales dans les multicouches composites de type A/B	50
Introduction	51
I) Etude de la diffusion de magnons dans les films inhomogènes	51
I.1) Matrice dynamique du film perturbé	51

I.2) Matrice de raccordement correspondante	52
I.3) Diffusion phononique et magnonique à travers les inhomogénéités	54
I.4) Conductances (Transmittances) magnoniques et phononiques	55
II) Diffusion des magnons dans les films composites perturbés de type A/B	56
II.1) Diffusion d'ondes de spins à travers les zones de cisaillement	56
II.1.1) Multicouche modèle étudiée	56
II.1.2) Résultats obtenus dans le cas des défauts de cisaillement	57
II.1.3) Interprétation des résultats obtenus dans le cas du cisaillement	66
II.2) Diffusion de magnons dans les films composites en présence de lacunes	71
II.2.1) Résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires	72
II.2.2) Interprétation des résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires	81
III) Conductances (Transmittances) phononiques	84
III.1) Résultats des spectres de conductance	84
III.1.1) Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 45°	85
III.1.2) Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 30°	86
III.1.3) Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes au centre du film	88
III.1.4) Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes aux extrémités du film	89
III.2) Interprétation des résultats obtenus des conductances phononiques	91
IV) Conclusion	92
Références du chapitre 3	93

Chapitre 4

Densités d'états phononiques & magnoniques locales dans une multicouche composite présentant des défauts de type cisaillement et lacunes

96

I) Introduction	97
II) Densités spectrales et densités d'états – Rappels	98
II.1) Formalisme théorique décrivant les densités phononiques et magnoniques	98
a) Les éléments de la matrice des fonctions de Green	98
b) Calcul des éléments de l'opérateur de Green G	99
c) Densités spectrales	102
d) Densités d'états	103
III) Résultats des spectres LDOS des sites irréductibles dans une multicouche composite	104
III.1) Résultats relatifs aux spectres des densités d'états magnoniques	104
III.1.1) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 45°	105
III.1.2) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 30°	106
III.1.3) LDOS en présence des lacunes au centre du film	107
III.1.4) LDOS en présence de lacunes aux extrémités	108
III.2) Résultats des spectres relatifs aux densités d'états phononiques	109
III.2.1) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 45°	110
III.2.2) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 30°	111
III.2.3) LDOS phononiques en présence de lacunes au centre	113
III.2.4) LDOS phononiques en présence de lacunes aux extrémités	114
IV) Interprétation et discussion des résultats LDOS obtenus	115
IV.1) Cas des magnons	115
IV.2) Cas des phonons	117
IV) Conclusion	119
Références du chapitre 4	120

Conclusion générale

121

Introduction générale

L'intérêt accordé aux multicouches et les structures miniaturisées vient des potentialités d'applications dans le domaine industriel [1-3]. Le choix de ces structures est motivé par leurs fonctionnalités qui sont fortement liées à leurs capacités à subir des changements en réponse aux variations des paramètres physiques qui caractérisent la configuration et l'environnement atomiques. La réponse aux contraintes externes est étroitement liée aux structures d'équilibre des systèmes considérés. Il est donc possible d'étudier des phénomènes thermodynamiques et même la diffusion et le transport via ces couches miniaturisées en présence de zones et parties altérées ou perturbées [4].

Les premières études sur la dynamique de plusieurs systèmes semi-infinis (avec réduction de la dimensionnalité) ont été réalisées par le physicien allemand W. Lederman, en 1944 [5]. Les études ont été complétées par I. M. Lifshitz et L. N. Rosenzweig, en 1948 [6], et T. E. Feuchtwang, par la suite, en 1967 [7].

Les propriétés physiques des systèmes à petite échelle sont totalement différentes de celles du massif conventionnel. Il est donc nécessaire, voire indispensable, de comprendre les caractéristiques fondamentales des couches et films artificiels et de contrôler leur comportement avant de faire usage et applications dans les différents domaines. Ces structures dites nanométriques présentent des propriétés extraordinaires pour leurs façons de diffuser et de transporter quantiquement les excitations élémentaires [8-10].

Dans les applications technologiques actuelles, les matériaux sont constamment soumis à diverses forces et contraintes qui agissent sur leur structure interne jusqu'à ce qu'elle soit parfois irréversiblement modifiée. Ces contraintes peuvent générer des perturbations géométriques qui entraînent des déformations atomiques localisées ou dynamique, telles que les fissures, les surfaces, les interfaces, les crans, les dislocations, ...

Par conséquent, les phénomènes de transmittance électronique [11], magnétique [12], vibratoire [13] et autres sont fortement perturbés en présence des contraintes.

Dans de nombreux domaines, de telles déformations peuvent provoquer de graves dysfonctionnements, voire de graves risques sanitaires et environnementaux. C'est pourquoi il est essentiel de pouvoir surveiller de près la structure des matériaux afin de prévenir d'éventuelles anomalies et accidents. Souvent les structures miniaturisées contiennent des inhomogénéités atomiques et/ou structurelles qui les rendent intéressantes dans les différentes applications.

Nous soulignons que les études expérimentales et théoriques portant sur les films minces et les multicouches artificielles sont accélérées, au cours des dernières décennies, par le progrès

et le développement des techniques de caractérisations et d'observation [14-15]. De plus, il est utile de rappeler qu'il existe de nombreuses façons de fabriquer ces films minces qui peuvent être classées en voies physiques et chimiques [16-17].

En général, les monocouches et les multicouches minces trouvent plusieurs applications comme éléments de la technologie moderne. On peut citer leur utilisation dans les capteurs (micro-capteurs, capteurs de flux de chaleur, capteurs de rayonnement, capteurs de pression, capteurs de puissance-électrique, etc.) et dans la micro-électronique, la protection contre la corrosion (revêtement), pour la fabrication d'outils de coupe, de cellules solaires ou simplement à des fins décoratives [18]. En particulier, l'attention accordée aux films minces magnétiques vient du potentiel commercial des applications dans l'industrie de l'enregistrement magnétique. L'un des objectifs de ce type de couches minces est d'augmenter la capacité de stockage des mémoires, tout en consommant beaucoup moins d'énergie.

Il est important de mentionner que tous les composants électroniques existants, actuellement, sont basés sur les conducteurs et les semi-conducteurs. Ces dispositifs utilisent le mouvement des électrons à travers les circuits pour véhiculer une information donnée.

Lors d'un fonctionnement, au fur et à mesure que les électrons se déplacent dans ces nanomatériaux, ils se dispersent, ce qui entraîne une résistance électrique, un chauffage et une dissipation d'énergie. Cette dissipation s'explique en partie par la dynamique du réseau atomique (sites atomiques vibrant en permanence avec de la transmission du voisin en voisin). Lorsque le courant passe à travers un fil ou un semi-conducteur, le chauffage inévitable provoque une perte d'énergie. Les appareils plus petits et les puces avec une densité plus élevée de transistors accélèrent la perte d'énergie (phénomène due au chauffage). Les transistors sont de plus en plus petits et atteindront bientôt les limites des performances conventionnelles basées sur les courants électriques, où ils ne peuvent pas être réduits. Alors au lieu de forcer les électrons à se pousser les uns contre les autres, on leur a juste fait subir un mouvement ondulatoire. A titre d'exemple, une onde d'énergie appelée onde de spin (oscillations des amplitudes de précessions des spins) peut se déplacer à travers un matériau électriquement isolant pour transmettre de l'énergie sans déplacer les électrons [19-21].

Afin de comprendre les mécanismes qui régissent la dynamique vibrationnelle et le mouvement de précession des spins à l'échelle nanométrique dans les films composites, en présence d'impuretés et d'inhomogénéités structurelles, nous proposons de modéliser certains dispositifs multicouches à épaisseur finie et de déterminer leurs spectres phononique et

magnonique. En d'autres termes, la présente thèse est consacrée à l'étude de deux types d'excitations élémentaires, à savoir : (i) les oscillations des orientations relatives des spins dans les films composites et magnétiques ; et (ii) la dynamique collective des positions relatives des atomes dans les multicouches composites.

i) Dans le premier cas, les oscillations des orientations génèrent une onde dite de spin. Dans ce genre d'excitations les propriétés thermodynamiques se déterminent facilement, telles que la magnétisation, la chaleur spécifique et les comportements dynamiques. Les ondes de spins peuvent également être considérées comme une quasi-particule appelée magnon. Les magnons peuvent se propager sans générer beaucoup de chaleur et de perdre beaucoup d'énergie et peuvent fournir des informations sur le spin même dans les isolants sans impliquer de charges mobiles. Cette propriété unique permet potentiellement une propagation d'onde de spin plus longue mais avec une dissipation plus faible.

L'étude de la magnonique dans les films ultramines présentant des défauts de structure ouvre des perspectives innovantes dans le domaine magnétique, car même s'ils sont bien préparés, ils présentent inévitablement des défauts ponctuels et structuraux, à l'échelle nanométrique. Certains défauts constituent une brisure de symétrie, pouvant jouer un rôle prépondérant sur les propriétés magnétiques des films ultramines, notamment sur le phénomène de localisation, la propagation, la dispersion d'ondes de spin et la diffusion magnonique [22].

En 1930, P. Bloch [23] a proposé une théorie basée sur le modèle de Heisenberg, dans lequel les premières excitations des aimants ferromagnétiques parfaitement alignés ont été analysées en termes d'ondes de spin, analogues magnétiques d'ondes de vibrations thermiques dans les cristaux.

ii) Dans le second cas, l'excitation collective des positions des atomes donne naissance aux ondes dites élastiques. Ces types d'ondes jouent un rôle crucial en physique de la matière condensée. Elles sont à l'origine de nombreuses propriétés physiques, telles que la conductivité thermique ou électrique, la propagation des ondes sonores ou la capacité à stocker la chaleur.

Lorsqu'un cristal vibre perd ou gagne de l'énergie, il le fait dans des paquets d'ondes dont la valeur est proportionnelle à la fréquence de vibration. Ce sont ces paquets d'énergie qui portent le nom de phonon. Les phonons peuvent être considérés comme le résultat des vibrations collectives des atomes dans un solide cristallin. Ce concept a été introduit par Albert Einstein, en 1905 [24].

La théorie classique de la dynamique des réseaux a été formulée par Lord Rayleigh [25], M. Born et T. Von Karman, en 1912 [26].

Aujourd'hui, l'utilisation de la simulation numérique permet de prévoir certaines propriétés physiques des nanomatériaux présentant un certain nombre d'inhomogénéités, de défauts, ou de désordre atomique. C'est ce qui nous a incité à entreprendre une étude analytique et numérique d'une variété de formes de défauts à savoir le cas de cisaillement pour deux angles différents (45° et 30°) et deux cas de lacunes atomiques (positionnées et localisées au centre de la structure, puis, le cas des sites vacants aux extrémités), dans une multicouche ferromagnétique de type composite. La multicouche est constituée de l'alternance d'une dizaine de monocouches de types A et B avec une épaisseur finie, suivant la direction (Oz). En d'autres termes, le système modèle parfait est une succession de deux monocouches A et B (structure A/B/ ... /A/B),

Les résultats relatifs à l'impact des lacunes et des angles de cisaillement sur le transport cohérent d'ondes de spin et d'ondes élastiques, la transmittance magnonique et phononique ainsi que les densités d'états locales (LDOS) sont exposés, en détails, dans les quatre chapitres qui composent la thèse.

Pour faciliter la compréhension de la théorie employée, nous avons rappelé quelques définitions et notions de base sur les magnons, phonons et les films minces, au premier chapitre.

Dans le deuxième chapitre, nous avons traité le phénomène de dispersion des magnons et des phonons dans les multicouches composites modèles idéales. Les courbes de dispersion sont déterminées par la diagonalisation de la matrice dynamique construite à partir de l'écriture des équations de mouvement de précession pour les spins et les équations de mouvement pour la dynamique du réseau atomique qui forme la cellule unitaire. Nous avons décrit les interactions entre les sites de spins par un Hamiltonien d'Heisenberg [27-28], pour les magnons et nous avons utilisé la deuxième équation de Newton pour la dynamique du réseau. De plus, seules les interactions entre les premiers et les seconds voisins seront prises en compte.

La diffusion des magnons et des phonons via les zones cisillées (45° et 30°) et en présence des lacunes (au centre et aux extrémités), ainsi que les conductances correspondantes sont traitées et rapportées dans le troisième chapitre.

Notre étude théorique se base sur l'approche de Landauer-Büttiker [29], utilisée dans le transport électronique, et la méthode dite de raccordement [30-34]. Cette dernière permettra de prendre en considération le problème de la brisure de symétrie causé par les défauts.

Le quatrième et dernier chapitre est consacré aux densités d'états locales (LDOS) de phonons et de magnons des films sous étude dans la présente thèse. Ces densités sont déterminées à l'aide de la matrice de diffusion associée à l'opérateur de Green et la méthode de raccordement.

Nous terminons le travail par une conclusion et les perspectives offertes dans le domaine de la magnonique et de la phononique.

Références bibliographiques

- [1] C.M. Wen, W. K. Liong, H. Afiq, R. Shahrizal, A. N. Ezaila, L.C. Siong, T. Michael and L. Peng, *Physica E* 116, 113731 (2020).
- [2] Z. Zhang, D.S. Valente, Y. Shi, D.K. Limbu, M.R. Momeni and F.A. Shakib, *ACS Appl. Mater. Interf.* 15, 9494 (2023).
- [3] M. Boutebdja, N. Baâdji, C. Beghidja, P. Rabu and A. Beghidja, *J. Molecular Struct.* 1271, 134041 (2023).
- [4] D. Johnstone, M. J. Colbrook, A.E.B. Nielsen, P. Öhberg and C.W. Duncan, *Phys. Rev. B* 106, 045149 (2022).
- [5] W. Ledermann, *Proc. R. Soc. Lond. A* 182,362 (1944).
- [6] I.M. Lifshitz and L.N. Rosenzweig, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 18, 1012 (1948).
- [7] M. Rivallin, M. Benmami, A. Gaunand and A. Kanaev, *Chem. Engin. Resear. Design*, 83, A1 (2005).
- [8] E. Vavilova, T. Vasilchikova, A. Vasiliev, D. Mikhailova, V. Nalbandyan, E. Zvereva, and S. V. Streltsov, *Phys. Rev. B* 107, 054411 (2023).
- [9] D. Spitz, J.M. Urban and J.M. Pawlowski, *Phys. Rev. D* 107, 034506 (2023).
- [10] W. Qin, B. Zou and A.H. MacDonald, *Phys. Rev. B* 107, 024509 (2023).
- [11] S. Huang, R. Duan, N. Pramanik, J.S. Herrin, C. Boothroyd, Z. Liu and L.J. Wong, *Nature Photonics* 1-7 (2023).
- [12] P. Lauria, W.T. Kuo, N.R. Cooper and J.T. Barreiro, *Phys. Rev. Lett.* 128, 245301 (2022).
- [13] Y. Pan, S. Li, M. Rahaman, I. Milekhin and D.R.T. Zahn, *2D-Materials* 9, 045018 (2022).
- [14] P.S. Rahimabadi, M. Khodaei and K.R. Koswattage, *X-Ray Spectrometry* 49, 348 (2020).
- [15] S.S. Raja, C.-W. Cheng, Y. Sang, C.A. Chen, X.Q. Zhang, A. Dubey, T.J. Yen, Y.M. Chang, Y.H. Lee and S. Gwo, *ACS Nano* 14, 8838 (2020).
- [16] P. Forouzandeh, P. Ganguly, R. Dahiya, S.C. Pillai, *J. Power Sources* 519, 230744 (2022).
- [17] R.Tao, J. Shi, F. Granier, M. Moeini, A. Akbarzadeh and D. Therriault, *Appl. Materials Today* 29, 101596 (2022).
- [18] X. Feng, D.C. Sayle, Z.L. Wang, S. Paras, B. Santora, T. Sutorik, T. X. T. Sayle, Y. Yang, Y. Ding, X. Wang and Y.S. Her, *Sci* 312, 1504 (2006).

-
- [19] A. Khitun, M. Bao and K.L. Wang, J. Phys. D: Appl. Phys. 43, 264005 (2010).
- [20] V.E. Demidov, M.P. Kostylev, K. Rott, J. Münchenberger, G. Reiss and S.O. Demokritov, Appl. Phys. Lett. 99, 082507 (2011).
- [21] B.A. Ustinov, A.V. Drozdovskii and B.A. Kalinikos, Appl. Phys. Lett. 96, 142513 (2010).
- [22] A. Bouali, R. Guinerbretiere and A. Dauge, J.Phys. IV 118, 183 (2004).
- [23] E.R. Speer, Lett. Math. Phys. 10, 41 (1985).
- [24] A. Einstein, Ann. Phys. 17, 891 (1905).
- [25] L. Rayleigh, J. Sci. 24, 145 (1887).
- [26] G .Belkacemi PhD-thesis, M. Mammeri University of Tizi-Ouzou, Algeria (2015);
H.L. Dryden, Nature 199, 20 (1963).
- [27] C.A.F. Vaz, J.A.C. Bland and G. Lauhoff, Rep. Prog. Phys. 71, 056501 (2008);
M. Müller, R. Montbrun, M. Marz, V. Fritsch, Ch. Sürgers and H. V. Löhneysen,
Nano-Lett. 11, 574 (2011).
- [28] S. Kotaru, S. Kähler, M. Alessio and A.I. Krylov, Comput. Chem. 44, 367 (2023).
- [29] M. Di Ventra, “*Electrical Transport in Nanoscale Systems*”, Cambridge University Press, (2008).
- [30] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil and M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter 19, 266208 (2007).
- [31] B. Bourahla, A. Khater and R. Tigrine, Thin Solid Films 517, 6857 (2009).
- [32] B. Bourahla, A. Khater and M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Web Conf. 29, 00011 (2012).
- [33] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine and R. Chadli, Eur. Phys. J. B 82, 53 (2011).
- [34] R. Challali, S. Sait, B. Bourahla and L. Ferrah. Spin 12, 2350001 (2023).

1 CHAPITRE

Excitations collectives de types phonons et magnons dans les couches minces

Sommaire

- I) Introduction
 - II) Ondes élastiques
 - 1) propagation des ondes élastiques
 - 2) Dynamique du réseau - Phonons
 - 3) Equation du mouvement des phonons
 - 4) Modes de vibration
 - III) Des magnons à la magnonique
 - 1) Ondes de spin et magnons
 - 2) Réflexion et transmission des ondes de spins
 - 3) La magnéto-résistance
 - 4) La spintronique
 - 5) La magnonique
 - IV) Les films minces
 - 1) Obtention des films minces
 - 2) Les interfaces cristallines
 - V) Conclusion
- Références du chapitre 1

I) Introduction

D'après la dualité onde-corpuscule [1-3], les ondes peuvent être décrites comme des particules. Le photon de la lumière en est un bon exemple. De même, l'onde générée par les vibrations collectives est équivalente à un phonon d'énergie (E) qui représente sa particule élémentaire.

Nous rappelons que les excitations du champ électromagnétique sous forme d'ondes donnent lieu à l'apparition de quanta d'énergie (les photons). Explicitement, lorsqu'un cristal de fréquence bien définie cède ou gagne de l'énergie, il ne peut le faire que par paquets d'énergie ($h\nu$) (h étant la constante de Planck). Ce paquet est considéré comme une quasi-particule, à savoir une particule fictive appelée phonon, dans le cas des ondes élastiques [4-7] et magnons dans le cas des ondes de spin [7-10].

Ce premier chapitre a pour objectif de présenter quelques notions et phénomènes indispensables à la compréhension de travail effectué dans cette thèse. La première partie est une introduction à la dynamique du réseau et à l'étude des phonons. Tandis que la deuxième partie est consacrée aux ondes de spins dans les matériaux ferromagnétiques. Dans la troisième et dernière partie, nous expliquons l'importance des films minces et des interfaces dans le développement de nouveaux matériaux avec des propriétés nouvelles et extraordinaires.

II) Ondes élastiques

Une onde élastique correspond à la propagation de la déformation locale d'un milieu qui s'appuie sur la matière. Les phénomènes ondulatoires ont des caractéristiques communes qui les distinguent de façon essentielle des processus de collisions entre corps. Les physiciens rendent compte de cette réalité en décrivant les ondes comme des objets moins localisés, mais tous aussi réels que les corpuscules, soumis à des interactions spécifiques : diffraction, réflexion, réfraction et interférences.

La physique a permis de décrire de façon précise le comportement de la matière subatomique. Les ondes obéissent au principe de Huygens.

Les ondes s'auto-engendrent par multiplication, le produit de deux ondes étant encore une onde. La résultante de deux ondes peut être à nouveau superposée à une troisième onde et former une nouvelle onde. On peut ainsi additionner un nombre quelconque de systèmes d'ondes.

L'utilisation des ondes élastiques touche des domaines aussi variés que l'évaluation non destructive des matériaux, la médecine [11-12], la sismologie [13-15] ou les télécommunications.

II.1) Propagation des ondes élastiques

Les ondes élastiques peuvent se propager soit selon un mode longitudinal, si la vibration du milieu est parallèle au sens de propagation. C'est-à-dire que les grandeurs vectorielles qui la caractérisent sont parallèles à la direction de propagation, c'est le cas lorsqu'on lâche un ressort comprimé. Par contre, si ces grandeurs sont perpendiculaire à la direction de propagation, l'onde est dite transversale, exemple une déformation qui se propage le long d'une corde.

Une onde plane progressive est constituée d'une succession de signaux unidimensionnels, elle est représentée par l'expression suivante : $s(x, t) = f(t - \frac{x}{v})$.

La grandeur (s) a la même valeur en tous les points d'un plan normal à la direction de propagation. Dans le cas où (f) dépend sinusoidalement du temps (l'onde plane est progressive sinusoidale), on peut poser avec un choix convenable de l'origine des temps :

$$s(x, t) = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) \quad (1.1)$$

Le ω étant la pulsation de l'onde et le A son amplitude.

On appelle la phase de l'onde la quantité (sans dimension) :

$$\varphi(x, t) = \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) = \omega t - kx \quad (1.2)$$

Le vecteur ($\vec{k} = k\vec{u}_x$) est appelé vecteur d'onde.

Les vaguelettes produites par la chute d'un objet ou par le passage d'un bateau à la surface calme de la mer sont un exemple simple permettant de visualiser une onde mécanique.

Dans cet exemple, les molécules d'eau initialement au repos réagissent à une impulsion en adoptant un comportement collectif caractérisé par un mouvement de va-et-vient vertical créant alternativement des crêtes et des creux qui se répètent un grand nombre de fois ; ce mouvement s'atténue graduellement avant de disparaître. On peut faire deux observations :

- si on néglige les effets d'atténuation, ce qui se passe, à un moment, est semblable à ce qui se passe un peu plus tard (c'est ce qu'on appelle la périodicité temporelle), et ce qui se passe, à un endroit, est semblable à ce qui se passe à un autre endroit (c'est la périodicité spatiale). Ce caractère périodique est présent dans la plupart des cas et permet de définir la fréquence d'une onde (mesurée en hertz) comme le nombre de répétitions du phénomène par seconde (et donc comme l'inverse de la période temporelle). On définit aussi la longueur d'onde comme étant la distance séparant deux crêtes successives (ou deux creux successifs). La vitesse de déplacement de ces crêtes est appelée vitesse de phase de l'onde. Dans l'exemple des vaguelettes, l'onde est dite transversale car le mouvement de l'eau est vertical donc transverse (c'est-à-dire perpendiculaire) à la direction horizontale de propagation de l'onde.

Dans le cas des ondes sonores, l'onde est dite longitudinale, le mouvement de va-et-vient du fluide transmettant le son étant parallèle à la direction de propagation de l'onde. Dans les deux cas, il faut soigneusement distinguer les mouvements de matière dont l'amplitude est faible de la propagation de l'onde, et donc du transport d'énergie qui affecte de grandes distances. Une caractéristique essentielle des ondes est, en effet, qu'elles transportent de l'énergie sans transport de la matière. Cette caractéristique est à la base de la propagation de l'information ; ce qui a révolutionné le monde informatique qui domine notre époque.

Des recherches intenses ont donné naissance à des nouvelles ondes qui ont les caractéristiques des ondes élastiques et qui ont des applications diverses dans l'industrie moderne parmi elles on peut citer les phonons et les magnons qui sont l'objet de notre étude.

II.2) Dynamique du réseau - Phonons

Les atomes constituant un réseau cristallin ne sont pas figés mais vibrent autour de leurs positions d'équilibre, en entraînant une modification du nuage électronique. Grâce aux forces interatomiques qui assurent la cohésion du cristal le mouvement des atomes se transmet de proche en proche en créant un état vibratoire qui est quantifié d'après le concept de dualité onde-corpuscule [16]. Il peut être représenté sous forme d'un paquet d'énergie considéré comme une quasi particule appelé phonon. Son énergie est le minimum associé à un mode de vibration [17]. Les effets des phonons dans l'industrie sont multiples, en particulier, dans le cas des surfaces et interfaces [18].

II.3) Equations de mouvement

Dans notre étude, les phonons ne seront pas pris comme des objets quantiques mais classique ce sont donc des ondes de vibrations se propageant dans un réseau cristallin qui seront soumis aux règles de la mécanique classique.

En effet, le mouvement d'un atome d'un site (n) est donné par la deuxième loi de Newton.

$$\sum_{n'} \vec{F}_{n,n'} = m_n \frac{d^2 \vec{u}_{(n,t)}}{dt^2} \quad (1.3)$$

L'indice (n') représente l'ensemble des différents sites adjacent au site (n).

Dans le modèle de force centrale l'équation précédente peut se réécrire comme suit :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}_{\alpha(n,t)}}{dt^2} = - \sum_{n \neq n'} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) k(n, n') [\vec{u}_{\beta}(n, t) - \vec{u}_{\beta}(n', t)] \quad (1.4)$$

α et β représentent les directions cartésiennes, m_n est la masse de l'atome n , et $\vec{u}_{\alpha}(n, t)$ l'amplitude de vibration. r_{α} est la composante cartésienne selon la direction α du vecteur $\vec{r}(n, n')$ joignant les positions d'équilibre des atomes n et n' , r est le module du vecteur $\vec{r}(n, n')$, enfin $k(n, n')$ est la constante de force qui couple les atomes n et n' .

II.4) Modes de vibration

On appelle mode propre de vibration, la vibration de tous les atomes d'un solide, à une fréquence bien définie. Dans l'hypothèse des ondes qui traversent le solide à une fréquence ω et pour lesquelles $\vec{u}_{\alpha}(n, t)$ représente l'amplitude locale de l'onde sur le site n ; on peut écrire cette amplitude comme :

$$\vec{u}_{\alpha(n,t)} = \vec{u}_{\alpha(n)} \exp(i(\vec{q} \cdot \vec{r}(n, n') - \omega t)) \quad (1.5)$$

Où $\vec{u}_{\alpha(n)}$ est l'amplitude vibrationnelle de l'atome (n) suivant la direction- α .

En tenant compte de l'équation (1.5), l'équation du mouvement de vibration de l'atome prendra la forme suivante

$$\omega^2 m_n \vec{u}_{\alpha(n,t)} = - \sum_{n \neq n'} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) K(n, n') [\vec{u}_{\beta}(n, \omega) - \vec{u}_{\beta}(n', \omega)] \quad (1.6)$$

La résolution de cette équation nous donne les différents modes de vibration du système.

Pour un système à N atomes par cellule élémentaire, on trouve (N) équations du mouvement dans une seule direction. Donc, il y a ($3N$) équations pour les trois directions cartésiennes qui sont caractérisées par les solutions ω_s , (avec $s=1, 2, \dots, 3N$, telles que $\omega_s \geq 0$).

Le système établi, à partir de ces équations, peut se mettre sous la forme matricielle :

$$[\omega^2 I - D_V(\vec{q}, k1, k2)]|u\rangle = 0 \quad (1.7)$$

Le $|u\rangle$ est le vecteur propre des déplacements atomiques et (I) la matrice identité. La matrice $D_V(\vec{q}, k1, k2)$ est appelée matrice dynamique. Elle est de taille ($3N \times 3N$). Elle dépend des constantes de forces entre les atomes.

Pour que ce système ait des solutions non triviales, il faut que cette condition soit vérifiée :

$$\det[\omega^2 I - D_V(\vec{q}, k1, k2)] = 0 \quad (1.8)$$

III) Des magnons à la magnonique

III.1) Onde de spin et magnons

Dans certains matériaux, tous les spins des électrons dans leurs coquilles se compensent. Ces matériaux sont appelés diélectriques, ils ne possèdent pas de moments magnétiques élémentaires. Dans un matériau paramagnétique, ces moments magnétiques élémentaires sont alignés arbitrairement par rapport à ceux des voisins, dans un ferromagnétique, ils sont alignés parallèlement dans un domaine magnétique tant que la température du matériau ferromagnétique est inférieure à la température de Curie.

Si nous plaçons le cristal dans un champ magnétique externe suffisamment fort, tous les moments magnétiques dans le cristal s'aligneront parallèlement au champ externe.

Si on dévie un ou quelques-uns de ces moments magnétiques de leur position d'équilibre, les moments environnants seront affectés, car chaque moment magnétique produit un petit champ magnétique, de sorte qu'ils seront également déviés légèrement. Puis, les moments environnants suivants sentent ceci et seront également déviés. De cette façon, une vague de moments magnétiques dipolaires déviés produits par les spins d'électron se propagent à travers le cristal, formant une onde de spin, qui a les caractéristiques d'une onde élastique.

Comme d'autres types d'ondes, les ondes de spin peuvent être créées, propagées, réfléchies, interférées, etc.

De plus, les ondes de spin peuvent encoder l'information en modulant la phase, l'amplitude ou la fréquence (exactement comme les ondes radio).

Un magnon peut être imaginé comme une précession complète distribuée sur une chaîne de spins, comme représenté sur la figure (1.1).

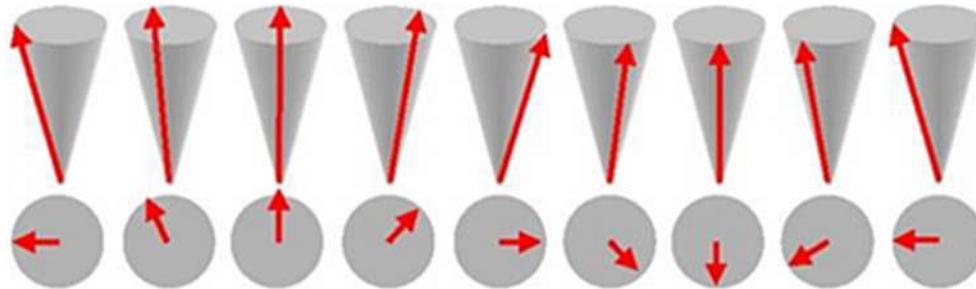


Figure (1.1) : Illustration de la formation d'une onde de spin.

La distribution de vitesse des magnons n'est pas simple que celle des photons. La vitesse d'un photon dans l'espace libre ne dépend pas de la direction et de la fréquence de propagation. Au contraire, la vitesse des magnons dépend de l'angle entre la direction de propagation et le champ magnétique externe et des fréquences de précession des spins individuels qui forment le magnon.

III.2) Réflexion & transmission d'ondes de spin

La réflexion est le changement de direction de propagation d'une onde lorsqu'elle rencontre un obstacle ou une interface joignant deux milieux, mais qu'elle ne pénètre pas dans le second milieu. Sa compréhension détaillée nécessite de comprendre l'interaction de l'onde incidente avec les sites présents dans l'obstacle, et en particulier la réaction de ces atomes et leur capacité à générer l'onde réfléchie [19], connue d'abord en optique, puis en acoustique.

Le phénomène de réflexion existe pour tous les types d'ondes, même s'il est extrêmement délicat de fabriquer des miroirs pour les ondes électromagnétiques de très haute fréquence.

La transmission (réfraction) est le changement de direction des rayons lumineux, lorsqu'ils passent d'un milieu à un autre, en traversant une interface entre ces deux milieux. Ce phénomène bien décrit par l'optique géométrique est commun à tous les phénomènes ondulatoires et sa cause est la différence des vitesses de propagation des ondes, selon les milieux qu'elles traversent.

Dans le cas des ondes lumineuses, le rapport des indices optiques des deux milieux est égal au rapport des célérités : $n_2/n_1 = c_1/c_2$. Si le milieu est d'indice variable, comme à l'intérieur

d'une fibre optique, la réfraction engendre une courbure des rayons lumineux [20-21]. Le phénomène de réfraction des vagues près des plages est dû à la variation de la vitesse des ondes mécaniques avec la profondeur de l'eau. On observe aussi des phénomènes de réfraction lorsqu'une onde sismique passe d'une couche géologique à une autre.

III.3) Magnétorésistance

L'effet de magnétorésistance géante (Giant Magnetoresistance Effect - GMR) est un effet quantique observé dans les films minces composés de monocouches ferromagnétiques et non magnétiques alternativement. Elle se manifeste sous la forme d'une diminution significative de la résistance lors de l'application d'un champ magnétique externe.

Historiquement, c'est A. Fert qui a travaillé sur des films à multicouches, par contre, la découverte de l'interaction des échanges antiferromagnétiques, entre les couches Fe/Cr [22], est attribuée à P. Grünberg, en 1986.

Deux ans plus tard (en 1988), la magnétorésistance géante a été découverte en couches monocristallines par deux équipes indépendantes ; celle d'A. Fert, de l'Université de Paris-Sud-Orsay, en France, et celle de P. Grünberg au Centre de recherche de Jülich, en Allemagne, [23-25].

Sur le plan pratique, il a fallu attendre une dizaine d'années pour pouvoir commercialiser le premier dispositif utilisant une magnétorésistance par IBM, en décembre 1997.

Aujourd'hui, le phénomène de magnétorésistance géante est largement utilisé dans les têtes de lecture GMR des disques durs. Les mémoires magnétiques non volatiles (mémoire d'accès aléatoire magnétique ou MRAM) sont une autre application.

En 2007, A. Fert et P. Grünberg ont reçu le prix Nobel de physique pour leur découverte de la GMR. Leurs travaux fondamentaux ont mené au développement d'un nouveau domaine de recherche en nanotechnologie, la spintronique (ou électronique de spin), qui exploite les propriétés quantiques du spin des électrons.

La spintronique guide les électrons en agissant sur la rotation de leur spin au lieu d'agir sur leur charge électrique. Elle a révolutionné la physique.

L'article intitulé « Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices » publié par A. Fert et ses collaborateurs, en 1988, est considéré comme le certificat de naissance de la spintronique qui est une technique qui exploite la propriété quantique de spin d'électron dans le but de stocker l'information. Il offre de nouvelles possibilités d'applications. En particulier, la réalisation de capteurs de très haute sensibilité, qui ont révolutionné le stockage magnétique de l'information, actuellement.

III.4) La spintronique

Le principe de la spintronique consiste à utiliser l'influence du *spin* sur la mobilité et le trajet des électrons dans les matériaux ferromagnétiques. Cette idée, a été suggérée, en 1936, par Mott [26], puis, à la fin des années 60, a été démontrée expérimentalement et décrite théoriquement [27,29].

Dans les métaux comme le Fer ou le Cobalt, les libres parcours moyens des électrons sont différents selon leur spin, ce qui entraîne une différence du courant porté par ceux-ci pouvant aller jusqu'à un facteur de dix (10). En plus, elle offre de nouvelles possibilités d'applications. Quand on lui applique un champ magnétique approprié, le spin de l'électron bascule d'une orientation à l'autre. Les dispositifs spintroniques exploitent cette propriété, qui permet de stocker de l'information ; le support matériel est divisé en minuscules zones correspondant à autant de bits d'information, et un champ magnétique est appliqué bit par bit pour orienter les spins des électrons des atomes. Chaque zone correspondra alors à un bit de valeur 0 ou 1, selon l'orientation haut ou bas des spins dans cette zone.

Un courant électrique traversant un matériau ferromagnétique va voir sa proportion d'électrons spin *down* et spin *up* se modifier. On dit que ces électrons sont polarisés en spin. Par ce fait, on arrive à inscrire une information dans le spin des électrons.

Un second matériau ferromagnétique traversé par ce courant polarisé, en spin, exercera une résistance différente selon la polarisation du courant et l'orientation de l'aimantation du matériau. Une mesure de la résistance électrique nous permet de lire l'information que le spin des électrons possède. Cet effet est exploité dans des composants appelés vannes de spin, et se présentant sous la forme d'une couche de métal piégée dans deux couches ferromagnétiques, à l'aimantation opposée ou parallèle [30].

L'utilisation conventionnelle de l'état d'un électron dans un semi-conducteur est un système purement binaire, puisque l'état représente seulement 0 ou 1 (suivant la charge de l'électron) équivalant à un bit, et 8 bits suffisent à représenter tous les nombres entiers entre 0 et 255, un nombre à la fois. Les bits en spintronique, nommés *qubits*, exploitent les états *spin up* et *spin down* comme une superposition de 0 ou 1, et 8 *qubits* possèdent la propriété de représenter tous les nombres entiers entre 0 et 255 de façon simultanée [31].

L'utilisation conjointe de matériaux aimantés et de l'électronique constitue la base des applications spintroniques de demain. Le phénomène clé à maîtriser reste le contrôle précis de l'orientation de l'aimantation des matériaux ferromagnétiques. Or, celui-ci était impossible à contrôler autrement que par l'application d'un champ magnétique, technologiquement difficile à intégrer dans la fabrication des circuits électroniques.

Or, en 1999, il a été découvert expérimentalement, sur la base de prédictions théoriques (publiées en 1996) qu'un courant polarisé en spin était capable d'agir sur l'orientation de l'aimantation d'un ferromagnétique simplement, par le transfert de moment cinétique entre les électrons constituant le courant et les électrons responsables de l'aimantation dans le matériau ferromagnétique dit CIMS (*Current Induced Magnetization Switching*).

Le domaine de l'électronique qui traite des ondes de spin, en dehors de la spintronique est appelé la magnonique.

III.5) La magnonique

La magnonique pourrait inaugurer une nouvelle ère dans l'électronique avec de nombreux avantages [32]. Tout d'abord, les ondes de spin sont faciles à produire et à manipuler. Elles apparaissent spontanément dans des cristaux commandés magnétiquement.

Les atomes peuvent être imaginés comme s'ils portaient le spin- $\frac{1}{2}$ et ont donc un moment magnétique dipolaire. Dans le cas où ces atomes sont organisés dans un réseau cristallin, nous pouvons imaginer le cristal comme étant un réseau avec un moment magnétique dipolaire attaché à chaque site de réseau.

VI) Les films minces

VI.1) Obtention de films minces

La préparation de structures synthétiques ultra minces, jusqu'à une échelle nanométrique est l'un des défis majeurs de la technologie moderne. Le but est de produire des matériaux artificiels aux propriétés améliorées.

On obtient un film mince, lorsqu'on réduit l'épaisseur des matériaux à quelques plans atomiques. Dans ce cas, les propriétés des structures sont totalement modifiées et l'influence des phénomènes de surface sur les propriétés physiques (électriques, magnétiques, optiques) sont nettement privilégiées et s'écartent notablement des caractéristiques connues.

Des effets dits quantiques peuvent commencer à dominer le comportement de ces structures artificielles, on obtient alors de nouvelles propriétés à étudier [33-35].

A titre d'exemple dans les matériaux magnétiques, on a enregistré la modification du moment magnétique, l'apparition des domaines et des parois spécifiques et l'effet magnéto-transport, le changement de l'axe de facile aimantation et surtout l'apparition d'une anisotropie de surface et pouvant aussi favoriser l'orientation perpendiculaire des moments magnétiques à la surface [36-39].

Les films minces peuvent être obtenus par deux approches différentes, l'une dite descendante ou « *Top-down* », elle consiste à réduire la taille du matériau jusqu'à quelques plans atomiques en produisant de très petits matériaux par attaque chimique en partant de grandes structures. L'autre approche est ascendante ou « *Bottom-up* » en déposant atome par atome, ou alors, par la technique d'épithaxie par jets moléculaires (MBE) qui permet d'obtenir une croissance contrôlée couche par couche, en faisant un dépôt atome par atome [40].

La commercialisation des films minces se sont accélérées, au cours de ces dernières décennies. Ceci est dû à leur utilisation et leur intégration comme éléments dans les nouvelles technologies. En particulier, dans les capteurs (micro-capteurs, capteurs de flux de chaleur, capteurs de rayonnement, capteurs de pression, capteurs de puissance électrique) et dans la micro-électronique, la protection contre la corrosion, pour la fabrication d'outils de coupe, de cellules solaires ou simplement à des fins décoratives [41].

L'objectif des systèmes miniaturisés est d'augmenter la capacité de stockage des mémoires, tout en consommant beaucoup moins d'énergie [42].

De plus, avant de faire des applications dans différents domaines de la physique, il est nécessaire de comprendre les caractéristiques fondamentales des films artificiels et de contrôler leur comportement dynamique (propriétés vibratoires et magnétiques).

Les empilements artificiels, tels que les super-réseaux, les multicouches, les couches minces, les sandwiches, ou d'objets à l'échelle nanométrique tels que les nano-fils et les boîtes quantiques, présentent des propriétés magnétiques, électroniques ou catalytiques différentes de celles des matériaux massifs. Ces matériaux doivent leurs propriétés spécifiques au fait qu'ils renferment des interfaces multiples aux caractéristiques particulières.

Aujourd'hui, la miniaturisation, des dispositifs, ouvre de larges perspectives industrielles. Elle constitue l'un des challenges, en ce moment. Son but est de créer des systèmes atomiques ou moléculaires capables de transférer une information à l'échelle du nanomètre (ordinateurs quantiques). Dans ce contexte, la science des surfaces/interfaces joue un rôle capital puisqu'elle permet l'élaboration de nano structures à géométrie parfaitement contrôlée. On souligne que même lorsqu'elles sont bien préparées, les surfaces cristallines présentent des défauts structuraux et localisés. L'état morphologique de la surface/interface se présente donc généralement sous la forme d'une distribution de marches, de terrasses atomiques, de hauteurs variées, de défauts ponctuels (adatoms, adlacunes) ou de puits atomiques, etc.

Ces inhomogénéités se présentent séparément ou simultanément.

La présence de ces défauts et nano structures est confirmée par des techniques expérimentales comme les microscopes à effet tunnel (S.T.M.) et à force atomique (A.F.M.), qui offrent une vision directe de la morphologie des surfaces.

Le départ d'une croissance parfaite à l'échelle atomique, sous forme d'une nano structuration de la surface ou sous forme de simples défauts ponctuels, induit en conséquence une modification des propriétés physiques, vibrationnelles et magnétiques de ces surfaces.

VI.2) Les interfaces cristallines

Les interfaces cristallines présentent un domaine d'application intéressant en physique du solide [43-45]. En effet, les vibrations des interfaces constituent une signature distinctive de leur composition chimique ainsi que de leur structure et organisation. Les vibrations nous renseignent aussi sur la nature des terminaisons chimiques de l'interface ou des adsorbats présents.

Grâce aux vibrations, on a également accès aux grandeurs dynamiques, comme la relaxation de l'énergie d'excitation moléculaire, en analysant les profils des raies, ou en employant des spectroscopies résolues en temps, par exemple, au moyen de lasers à impulsions.

Les spectroscopies vibrationnelles fournissent donc essentiellement la composition chimique des surfaces, mais indiquent également l'environnement de ses constituants, tout comme leur organisation et leur orientation. Les recherches dans ce domaine requièrent de nombreuses méthodes expérimentales de plus en plus sophistiquées. Pour inspecter les vibrations d'interface, on peut utiliser une diversité de techniques de diffusion atomique, neutronique, électronique ou photonique [46-48]. Elles reprennent aussi des mesures d'absorption des rayonnements variés et s'étend de procédures dérivées de la diffraction des rayons X jusqu'aux microscopies à effet tunnel, à force atomique ou spectroscopies optiques non linéaires (SONL), en passant par l'examen des photoélectrons issus de niveaux de cœur ou des bandes de valence des édifices chimiques de surface.

VII) Conclusion

Dans le but de comprendre les effets des surfaces et des interfaces sur les excitations élémentaires, dans les films minces composites, (telles que les phonons et les magnons), une intense activité de recherche est menée ces dernières années, par plusieurs chercheurs, en physique de la matière condensée. Nous rappelons que la science des interfaces/surfaces joue un rôle important, puisqu'elle permet la conception de plusieurs matériaux fonctionnels avec une géométrie parfaitement contrôlée.

Aujourd'hui, les progrès technologiques et le développement des techniques de dépôt favorisent la création et la caractérisation de couches magnétiques artificielles et multicouches miniaturisées. Il est utile de signaler l'existence de nombreuses façons de fabriquer ces couches minces. Elles peuvent être classées en voies physiques et chimiques ce qui a permis de les contrôler et d'élargir leurs domaines d'application.

Références du chapitre 1

- [1] D. Halliday, R. Resnick and J. Walker, *Ondes, optique et physique moderne*, Éditions de la Chenelière Inc, Canada (2004).
- [2] M. Alonso, J.E. Finn J.E. ; *Physique Générale*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc (1967).
- [3] J.D. Davies, *Hadronc J.* 35, 109 (2012).
- [4] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Physique des Solides*, EDP Science (2002).
- [5] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod Eds. (1998).
- [6] M.T. Dove, *Structure and Dynamics: an atomic view of materials*, Oxford master series in condensed matter physics, Oxford University Press, Oxford (2003).
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann (2007).
- [8] P.A. McClarty, *Annual Rev. Condens. Mat.* 13, 171 (2022).
- [9] S.M. Rezende, A. Azevedo and R. L. Rodríguez-Suárez, *J. Appl. Phys.* 126, 151101 (2019)
- [10] T. Neuman, D.S. Wang and P. Narang, *Phys. Rev. Lett.* 125, 247702 (2020).
- [11] J.Vergniol and V. de Lédighen, *La Presse Médicale* 38, 1516 (2009).
- [12] S. Esen, M. Sunbul, H. Leblebicioglu, C. Eroglu, D. Turan, *Swiss Med. Wkly.* 134, 347 (2004).
- [13] M.A. Biot, *J. Acoust. Soc. Am.*, 28, 168 (1956).
- [14] J. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec and A.C. Hladky-Hennion, *Phys.Rev. B*, 77, 085415 (2008).
- [15] J. Bascou, G. Barruol, A.Vauchez, D.Mainprice, and M. Egydio-Silva, *Tectono-Phys.* 342, 61 (2001).
- [16] W. Zhang, T. Fisher and N. Mingo, *J. Heat Transf.* 129, 487 (2007).
- [17] K. Gordizand and A. Henry, *J. Apl. Phys.* 119, 015101 (2016).
- [18] S.S. Mahajan, M.D. Bambole, S.P. Gokhale and A.B. Gaikwad, *Prama J. Phys.* 74, 447 (2010).
- [19] L. Temdie, V. Vlaminc, V. Castel and M.B. Jungfleisch, *Colloque Louis Néel* (2022).
- [20] R.R. Aggarwal. *J. Phys. Radium* 20, 812 (1959).
- [21] J.L. Verneuil, Thèse de Doctorat, Université de Limoges, France (2003).
- [22] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau and F. Petroff , *Phy. Rev. Lett.* 61, 2472 (1988).
- [23] P. Griinberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky and H. Sowers, *Phys. Rev. Lett.* 57, 2442 (1986).
- [24] F. Saurenbach, U. Walz, L. Hinchey, P. Griinberg and W. Zinn, *J. Appl. Phys.* 63, 3473 (1988).

- [25] G. Binasch, P. Grünberg and G. Saurenbach, *Phys. Rev. B* 39, 4828 (1989).
- [26] N.F. Mott, *Proc. Roy. Soc. A* 153, 699 (1936).
- [27] A. Fert and I. A. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* 21, 1190 (1968).
- [28] A. Fert, *Rev. Mod. Phys.* 80, 1517 (2008).
- [29] B. Loegel and F. Gautier, *J. Phys. Chem. Sol.* 32, 2723(1971).
- [30] G. Li, S. Sun, R.J. Wilson Robert, L. White, N. Pourmand and S.X. Wang, *Spin valve sensors*, Elsevier Rev. Pages 98-106 (2006).
- [31] Y.M. Bunkov, *J. Exp. Theor. Phys.* 131, 18 (2020).
- [32] K. Xie, L. Zhang and F. Ma, *J. Appl. Phys.* 130, 153901 (2021).
- [33] C. Tsallis, *J. Math. Phys.* 19, 277 (1978).
- [34] D.C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer Verlag (1988).
- [35] R.M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer Verlag (1987).
- [36] D.C. Wallace, *PR*, 128, 1614 (1962).
- [37] S. Petit, *EDP Sciences, Collection SFN* 10, 449 (2010).
- [38] H.T. Diep, *Physique de la matière condensée*, Dunod Eds. (2003).
- [39] T. Holstein and H.P. Primakoff, *Phys. Rev.* 58, 1098 (1940).
- [40] M. Ohring, *Materials science of thin films*, Academic Press, Elsevier Inc. (2002).
- [41] G. Hass, M.H. Francombe, R.W. Hoffman, *Physics of Thin Films Advances in Research and Development*, Rreview Elsevier (2013).
- [42] K.B.R.Teja,N.Gupta,Superlatt. Microstruct.142, 106513 (2020).
- [43] M. Lassri, A. Elamiri, K. Chafai, M. Abid and E.K. Hlil, *J.Supercond. Nov. Magn.* 29, 1371 (2016).
- [44] Z. Zhu, S. Zheng, S.Peng, Y. Zhao and Y. Tian, *Advanced Materials* 29, 45 (2017).
- [45] C. Salas, T.Nypelö, C.Rodriguez-Abreu and O.J. Rojas, *Col. Interf. Sc.*19, 383 (2014).
- [46] L.M. Grossman,J.P. Hennart, *Prog. Nucl. Energ.*17, 271(1986).
- [47] Y.L. Hoo,W. Jin, H.L. Ho and D.N. Wang, *IEEE Photonics Tech. Lett.*15, 1434 (2003).
- [48] G. Ehrlich and F. G. Hudda, *J. Chem. Phys.* 44, 1039 (1966).

CHAPITRE**2****Relations de dispersion des phonons et des magnons dans les multicouches composites****Sommaire**

I) Introduction
II) Théorie et méthodes de calculs
III) Relations de dispersion des excitations élémentaires
III.1) Dispersion des ondes de spin dans les multicouches composites ferromagnétiques
1.1) Structure modèle
1.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique
1.3) Courbes de dispersion des magnons
1.4) Impact de l'anisotropie de surface sur la dispersion de magnons
1.5) Effet de l'intensité du spin sur la dispersion de magnons dans un film composite
III.2) Dispersion des ondes élastiques les multicouches composites parfaites
2.1) Structure modèle
2.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique
2.3) Relations de dispersion des phonons
2.4) Phonons acoustiques
2.5) Phonons optiques
IV) Vitesses de groupe
V) Les modes évanescents
VI) Conclusion
Références du chapitre 2

I) Introduction

Dans les matériaux solides, la conduction de l'énergie s'effectue principalement de deux façon différentes : soit par voie électronique, soit par vibration atomique.

Dans les conducteurs, les effets électroniques sont prépondérants, tandis que dans les isolants et les semi-conducteurs (où les électrons sont fortement liés aux noyaux) l'énergie se transmet par vibrations du réseau cristallin, dont l'origine peut être l'effet d'une agitation thermique ou d'une excitation électromagnétique.

De plus, chaque matériau est un ensemble de cristaux constitués d'atomes, qui contiennent à leurs tours des électrons qui tournent autour des noyaux. L'électron décrit une orbite dont le déplacement de charge est équivalent à un courant électrique. D'après la loi d'Ampère, ce courant crée un moment magnétique. Si les moments ne se compensent pas, on obtient des structures magnétiques. Les oscillations des amplitudes relatives des spins permettent de définir une onde dite de spin.

La propagation des ondes dans les assemblages atomiques et de spins est fortement perturbée par l'existence de différents types d'inhomogénéités et la brisure de symétrie, ce qui conduit à l'apparition des phénomènes de localisation et la modification des propriétés physiques.

L'étude de la dynamique du réseau (atomique ou de spin) peut conduire à une meilleure connaissance des caractéristiques de la structure et constitue ainsi un moyen de contrôle de fabrication fiable de composants électronique, mécaniques ou optiques.

En revanche, l'étude des phénomènes liés aux perturbations de la configuration géométrique d'un assemblage atomique ou de spins nécessite une description précise des propriétés physiques, à l'échelle atomique, ce qui fait toute la difficulté de leur modélisation. Par conséquent, les modèles théoriques doivent prendre en compte le caractère atomique de la matière avec une précision suffisante.

II) Théorie et méthodes de calculs

- Dans la littérature, pour étudier les dynamiques vibrationnelle et magnétique des systèmes semi-infinis (avec brisure de symétrie), les scientifiques ont utilisé, initialement, la méthode de diagonalisation directe (Slab method).

Par le passé, cette méthode a été pratique et puissante. Elle a été introduite dans sa formulation générale par Clark, en 1965 [1]. Sa première application à un système physique a été réalisée par R. Fuchs et R.E. Allen [2-4]. Ils se sont plus particulièrement intéressé aux modes de surface d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche absorbée.

Le principe de la méthode consiste à limiter les systèmes étudiés à un nombre fini de plans atomiques dans une direction donnée, avec une extension infinie dans les deux autres directions. En outre, le nombre de plans, utilisés pour la modélisation, doit être suffisamment grand afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système.

La résolution numérique de la matrice dynamique permet de déterminer les vecteurs et les valeurs propres, ce qui donne accès ensuite aux propriétés des surfaces.

Le désavantage de cette méthode est d'utiliser des matrices de tailles importantes, ce qui augmente le temps de calcul lors des simulations numériques.

- La deuxième méthode décrite et employée par les chercheurs est celle dite des fonctions de Green. On rappelle qu'en physique, on appelle fonction de Green ce que les mathématiciens appellent *solution élémentaire* d'une équation différentielle linéaire à coefficients constants, ou d'une équation aux dérivées partielles linéaire à coefficients constants. Ces fonctions ont été introduites par George Green [5].

Ces dernières années, dans le domaine de l'électromagnétisme, les fonctions de Green ont été les plus utilisées pour l'étude de la dynamique des systèmes réels. Elles ont été appliquées pour la première fois à la physique de l'état solide par Slater [6].

Le principe de la méthode consiste à créer un réseau semi-fini à partir d'un réseau illimité, en annulant les interactions entre les atomes ou les spins situés de part et d'autre d'un plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. L'effet de cette modification sur la dynamique du système est considéré comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique D du système illimité en une matrice perturbée D_p .

- La troisième méthode utilisée pour décrire la dynamique des systèmes semi-infinis ou perturbés est la méthode dite de raccordement [7-10].

Pour traiter le problème de la dispersion des magnons ou des phonons en présence de défauts localisés ou structurelles, la méthode de raccordement s'est révélée comme un outil très puissant, qui est capable de résoudre les problèmes de localisation aussi bien que les problèmes de diffusion dans tous types de structures sans aucune restriction ou conditions contraignantes. La méthode a été introduite pour la première fois par T.E. Feuchtwang, en 1967 [11]. Elle consiste à décrire le mouvement des sites (atomiques et spins) par un nombre fini d'équations.

Son principe est basé sur le raccordement entre les états localisés générés par les inhomogénéités et les modes évanescents de volume.

Son application exige que le film mince soit divisé en trois zones distinctes comme indiqué sur la figure (2.1).

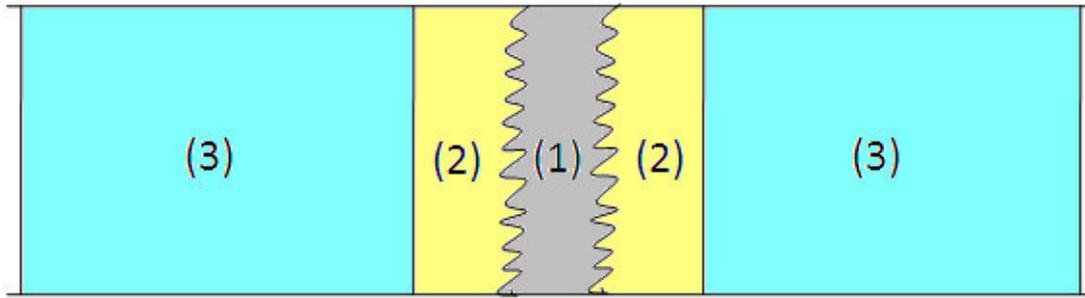


Figure (2.1) : Représentation schématique d'un défaut de structure couplant deux films minces, selon le concept de la méthode raccordement.

i) Zones parfaites, numérotées par (3)

C'est la région où on retrouve la partie du film mince sans défauts. Les différents sites ne sont pas influencés par la présence du défaut (sites atomiques dans le cas des phonons / sites des spins dans le cas des systèmes magnétiques).

Ces zones sont caractérisées par des périodicités idéales. Il est utile de mentionner que les structures situées de part et d'autres des zones 2, ne sont pas nécessairement identiques ou de même type (elles peuvent être différentes).

La dynamique des sites de ces zones permet de tracer les courbes de dispersion des systèmes parfaits (sans défauts) et de définir les modes dynamiques propageant et les modes évanescents du système sous étude.

Dans l'étude dynamique (pour les phonons ainsi que les magnons), on cherchera toutes les solutions du système sauf celles qui donnent lieu à des modes divergents. Ces solutions sont obtenues par la méthode introduite par A. Fellay et al. [12-13], qui consiste à linéariser le système en augmentant la base des vecteurs propres des sous-systèmes parfaits et idéaux.

ii) Zone de défaut, numérotée par (1)

C'est la région qui renferme les différents types de nanostructures, inhomogénéités ou défauts. Elle est généralement affectée par la relaxation et la reconstruction, d'où la perte de la périodicité du réseau. Elle permet d'obtenir la matrice dynamique du système perturbé, et cela en écrivant les équations de mouvement des atomes et la précession des spins de la zone (1) et celles des zones, notées (2) dites zones de raccordement.

Dans ce cas, la matrice dynamique est de forme rectangulaire $D(m,n)$ de dimension $(m \times n)$. Avec m est le nombre d'atomes ou spins dans la zone (1) et (2) et n est le nombre d'atomes ou spins dans les zones (1) et (2) ainsi que les spins qui joignent les zones (2) aux zones (3).

iii) Zones de raccordement, numérotées par (2)

C'est la région intermédiaire entre les régions parfaites et la région de défaut. Elles permettent dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par les sites situés dans la zone (1), dite de défaut aux états dynamiques (vibrationnels et processionnels) des zones parfaites.

On obtient une matrice $D_R(n,m)$ dite de raccordement, qui relie analytiquement les déplacements atomiques ou amplitudes processionnelles appartenant à la zone de défaut et ceux des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits (3), situés de part et d'autre de la zone nano-structurée.

Dans ce qui va suivre, on déterminera, dans une première étape, les courbes de dispersion des magnons dans les multicouches ferromagnétiques, constituées d'une succession d'une dizaine de monocouches alternées de types A et B.

Dans une seconde étape, on tracera les courbes de dispersion des phonons dans les mêmes structures composites.

III) Relation de dispersion des excitations élémentaires

III.1) Dispersion de magnons dans une multicouche composite ferromagnétique

III.1.1) Structure modèle

La multicouche modèle utilisée dans notre étude (analytique et numérique) possède une épaisseur finie suivant la direction [001]. Elle est de la forme A/B/A/ .../B.

On l'obtient par l'alternance de deux types de monocouches de spins A et B, parallèles et couplées ferromagnétiquement. Au niveau de chaque nœud du réseau, nous supposons l'existence d'un vecteur de spin, soit S_A ou S_B .

- Dans la même monocouche, chaque site de spin est entouré de spins de même type (le site A portant un spin S_A est entouré par des spins de type A et le site B, de vecteur S_B , ses voisins sont des sites B). Par contre, suivant la verticale (axe Oz), les voisins de A sont B et vice versa ;

- les sites sont séparés d'une distance interatomique (a), et les interactions entre plus proches voisins sont considérées. Ces spins sont orientés dans la même direction et sont répartis d'une façon homogène et uniforme.

Les constantes d'échange entre les différents sites de spin du film sont notées, respectivement par : J_{1AA} (au niveau de la monocouche ayant des sites de spins de type A) et J_{1BB} (entre sites dans la monocouche de type B) et J_{1AB} (entre sites A et B, suivant la verticale). La multicouche composite modèle étudiée est représentée sur la figure (2.2).

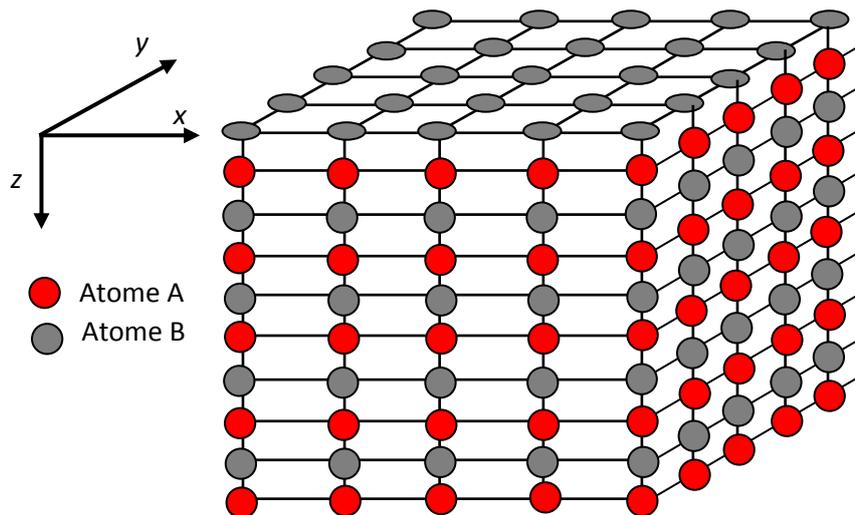


Figure (2.2) : Représentation schématique d'un film mince de type composite, constitué d'une succession de dix monocouches parallèles.

Notre objectif dans ce chapitre est de tracer les courbes de dispersion dans les multicouches constituées d'une dizaine de plans parallèles et couplés ferromagnétiquement. Nous examinons également l'influence de l'anisotropie de surface, l'effet de l'intensité du spin et l'impact de l'orientation de l'onde incidente excitatrice sur les largeurs des bandes permises et interdites observées sur les courbes de dispersion des spins dans le film composite.

III.1.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique

Les magnons proviennent de la quantification des ondes de spin. L'énergie des magnons peut-être expliquée par le renversement des vecteurs de spins (orientations relatives). L'état fondamental d'un corps ferromagnétique simple est caractérisé par le parallélisme de tous les spins. La dynamique de la structure (précession des spins) est décrite par la dynamique des N sites qui forment la cellule unitaire.

Dans certains films, au niveau des monocouches situées aux extrémités une anisotropie surfacique se manifeste. Cette dernière a été introduite pour la première fois par L. Néel [14-15], qui observa souvent une direction préférentielle des spins suivant l'axe de facile aimantation dirigée, en général, suivant l'axe (Oz). Pour relever son impact, sur la précession des spins, nous ajoutons un terme descriptif, dans l'expression de l'Hamiltonien.

Le mouvement de précession d'un vecteur de spin \vec{S} , situé sur un site atomique du film composite parfait, en présence de l'anisotropie est décrit par un Hamiltonien d'Heisenberg [16-17], il est donné par

$$H = -2 \sum_{(p,p')} J_{pp'} \vec{S}_p \vec{S}_{p'} - g \mu_B H_0 \sum_p S_p^z - \sum_p H_p (S_p^z)^2 \quad (2.1)$$

\vec{S}_p et $\vec{S}_{p'}$ sont les vecteurs de spin, et $p(p_x, p_y, n)$. Les indices (p_x, p_y, n) décrivent les composantes du site p suivant x , y et z -directions, respectivement. La constante $J_{pp'}=J$ est appelée constante d'échange. Elle couple les sites adjacents p et p' .

Le premier terme décrit l'énergie d'échange, le deuxième terme correspond à l'effet Zeeman (où μ_B est le magnéton de Bohr, g est le facteur de Landé et H_0 est le champ extérieur appliqué). Le troisième terme décrit l'anisotropie, avec H_p est le champ d'anisotropie.

NB : Le deuxième terme est négligé dans ce travail, car nous avons considéré que les systèmes étudiés loin de tout champ magnétique extérieur.

En se basant sur la périodicité spatiale du réseau de spins, deux spins p et p' occupant deux sites équivalents du réseau effectuent à une phase près les mêmes mouvements de précession. C'est pourquoi, leurs amplitudes vérifient à chaque instant t , la relation

$$\vec{u}(p', \omega) = \vec{u}(p, \omega) \times e^{j(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2.2)$$

Le vecteur \vec{q} représente le vecteur d'onde du réseau réciproque et \vec{r} est le vecteur joignant la position d'équilibre du spin p à celle du spin p' .

En tenant compte de l'équation (2.2), les équations du mouvement de précession des spins formant la cellule unitaire dans la figure (2.2), peuvent se mettre sous la forme matricielle d'un problème aux valeurs propres.

$$[\Omega I - D(Z, e^{j\phi_y})] \xi_p^\pm = |0\rangle \quad (2.3)$$

Où Ω est la fréquence normalisée sans dimensions, donnée par $\Omega = \frac{\omega}{\omega_0}$, avec ω_0 est la

fréquence caractéristique du film composite. Elle est exprimée par $\omega_0 = \frac{2J_{AA} S_A}{\hbar}$ (si on

normalise par les grandeurs de la monocouche A), ou bien $\omega_0 = \frac{2J_{BB} S_B}{\hbar}$, si on normalise par

les grandeurs de la monocouche B). La matrice I représente la matrice identité, du même rang que la dimension de la matrice dynamique $D(10 \times 10)$.

Nous mentionnons que la taille de la matrice se repère par le nombre de sites de spins par cellule unitaire, permettant de décrire la dynamique de la multicouche. De plus, la matrice dynamique du film composite parfait (D est une fonction des paramètres $Z = q_x a$ et $\varphi_y = q_y a$ qui sont, respectivement les facteurs de phases entre sites adjacents, dans les directions (Ox) et (Oy)). Le vecteur $|\xi_p^\pm\rangle$ correspond au vecteur décrivant le mouvement de précession des spins.

La diagonalisation de l'équation (2.3), permet d'avoir accès aux courbes de dispersion des magnons dans le film composite à couplage ferromagnétique. Ses valeurs propres se calculent par la relation suivante

$$\det[\Omega I - D(Z, e^{i\phi_y})] = 0 \quad (2.4)$$

III.1.3) Courbe de dispersion des magnons

Les résultats des simulations numériques qui correspondent à la dispersion des magnons une multicouche à couplage ferromagnétique sont tracés sur la figure (2.4), en absence de l'anisotropie de surface.

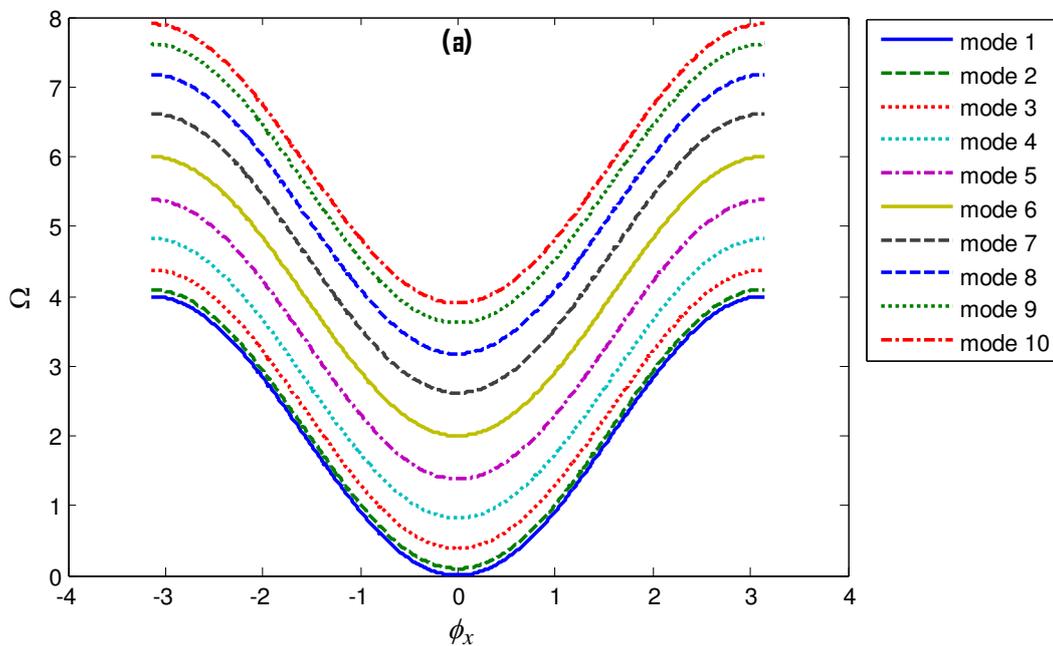


Figure (2.3.a) : Courbes de dispersion d'une multicouche ferromagnétique de type composite $\Omega = f(\varphi_x)$, constitué de dix plans parallèles, formée à partir d'une succession de deux monocouches A et B, dans le cas d'une incidence $\varphi_y = 0$,

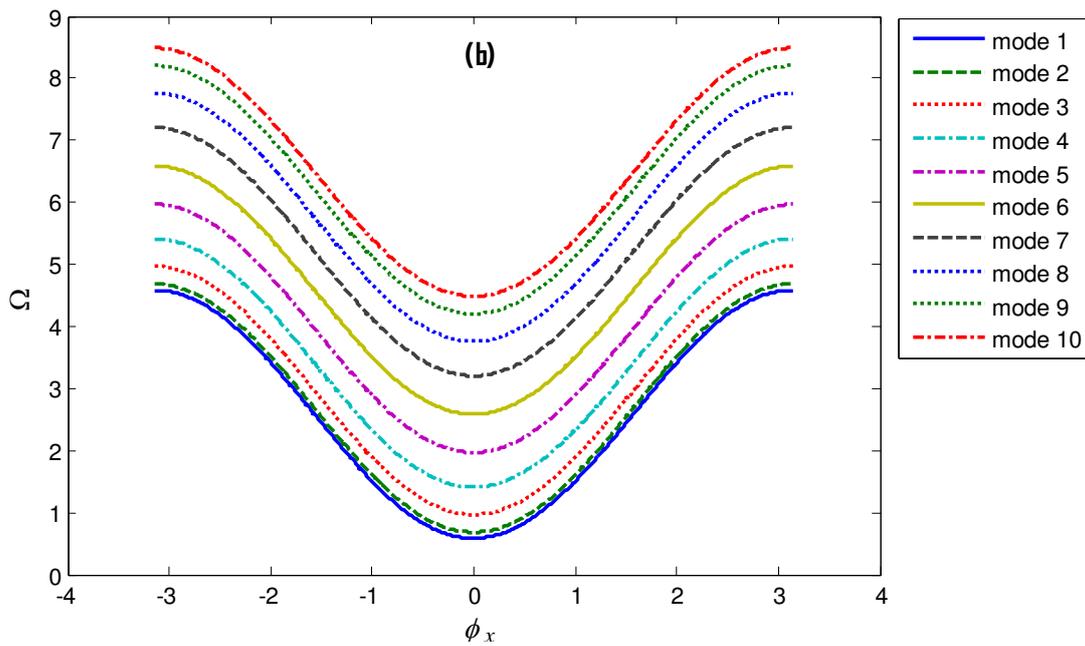


Figure (2.3.b) : Courbes de dispersion d'une multicouche ferromagnétique de type composite $\Omega = f(\phi_x)$, constitué de dix plans parallèles, formée à partir d'une succession de deux monocouches A et B, dans le cas d'une incidence $\phi_y = \pi/4$.

Interprétation des résultats

La résolution de l'équation (2.3) pour une valeur Z donnée, donne accès aux dix (10) modes propres de précession dans le film composite ferromagnétique. Les courbes de dispersion (énergie normalisée des modes) sont tracées en fonction du vecteur d'onde $\phi_x = q_x a$, lorsque q_x parcourt la première zone de Brillouin.

Les modes propres de précession correspondent aux solutions pour lesquelles les facteurs de phase $|Z| = 1$.

Nous signalons que le nombre de modes dépend de la géométrie de la structure. Il est égal aux nombres de sites par cellule unitaire multiplié par le nombre de degrés de libertés.

Sur la figure (2.3a), les modes sont numérotés de bas en haut, avec une énergie croissante (le choix est arbitraire, autrement dit, on peut faire un autre choix). Ils sont représentés dans le cas où $\phi_y = 0$ (incidence rasante).

Nous constatons que les dix modes s'étalent sur un intervalle qui correspond à la plage des bandes permises pour les oscillations des sites de spin qui forment la cellule unitaire.

Les plages de propagation des dix modes de précession du film composite sont dressées dans le tableau suivant :

Intervalle de propagation	Incidence $\varphi_y = 0$		Incidence $\varphi_y = \pi/4$	
	Ω_{\min}	Ω_{\max}	Ω_{\min}	Ω_{\max}
Mode 1	0.00	3.99	0.58	4.58
Mode 2	0.10	4.10	0.68	4.68
Mode3	0.38	4.37	0.97	4.97
Mode4	0.82	4.82	1.41	5.40
Mode5	1.38	5.38	1.97	5.97
Mode6	2.00	5.99	2.59	6.58
Mode7	2.62	6.61	3.20	7.19
Mode8	3.18	7.17	3.76	7.76
Mode9	3.62	7.62	4.20	8.20
Mode10	3.90	7.90	4.49	8.48

Tableau (2.1) : Plages de propagation des différents modes de précession dans une multicouche ferromagnétique composite à deux sites différents, pour deux angles d'incidence $\varphi_y = 0$ et $\varphi_y = \pi/4$.

Nous notons que dans certaines plages de fréquence, les modes de magnons se chevauchent. Ce qui signifie que ces modes peuvent être excités simultanément. Ceci constitue un filtre pour certains magnons à des fenêtres de fréquences bien précises.

Nous remarquons que le premier mode est acoustique (du fait que son énergie est nulle lorsque le vecteur d'onde q_x tend vers zéro. Les neuf autres modes sont optiques (leurs énergies différentes de zéro, quand q_x tend vers zéro).

Sur la figure (2.3b), nous avons tracé les courbes de dispersion, pour un angle d'incidence différent de zéro, $\varphi_y = \pi/4$. Nous constatons qu'il a un impact sur la nature des modes et les plages de propagation. Mais, la forme globale reste inchangée (il y a juste un décalage vers le haut). Dans ce cas tous les modes sont optiques.

Les autres remarques du cas précédent restent valables pour la nouvelle direction d'excitation.

Dans ce travail, nous avons aussi représenté les facteurs de phases du film composite sur la figure (2.4). Ils s'appellent aussi courbes de dispersion à trois dimensions (3D).

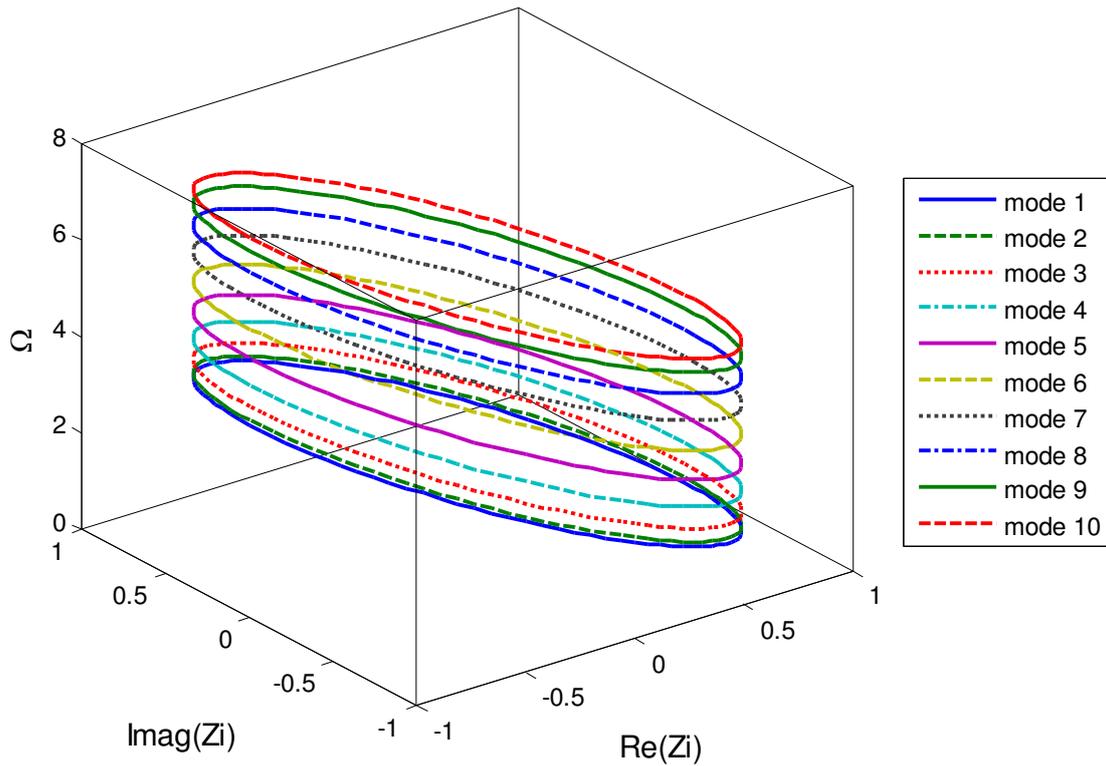


Figure (2.4) : Courbes de dispersion d'une multicouche composite à 3 dimensions. Elle correspond aux paramètres de la figure (2.3a). L'énergie de dispersion est exprimée en fonction des facteurs de phases Z_i ($i = 1, \dots, 10$).

Les facteurs de phases sont des complexes et les modes propageants ont un module égal à l'unité. Ils peuvent être tracés dans un cercle de rayon unité. La composante verticale donne l'énergie de dispersion dans le film mince et les deux autres composantes décrivent les parties : réelle et image des nombre Z , qui sont des complexes.

Les modes propageant et évanescents sont décrits par le doublet $\{Z, Z^1\}$.

Les simulations sont réalisées pour les valeurs normalisées des intégrales d'échanges. Pour les valeurs de J_{AB} , nous avons pris la moyenne arithmétique entre celles des plans composant le film composite. C'est-à-dire $J_{AB} = (J_{AA} + J_{BB})/2$.

III.1.4) Impact de l'anisotropie de surface sur la dispersion des magnons

Comme les deux plans, situés aux extrémités du film, ont une coordonnée différente de celle des autres monocouches, ce qui entraîne le phénomène de la reconstruction et de la relaxation. Alors, pour en tenir compte de ces deux phénomènes, nous avons introduit l'anisotropie dite de surface qui dépend des deux effets.

Pour traiter le problème de la dispersion des magnons en présence de la brisure de symétrie (surface) dans les films multicouches minces ferromagnétiques, nous avons tracé les courbes de dispersion pour une valeur $H_a = 10\%J_{pp} \neq 0$ sur la figure (2.5).

Pour relever son impact (de l'anisotropie), nous comparons la figure (2.5) à la courbe (2.4) (tracée dans le cas où $H_a = 0$).

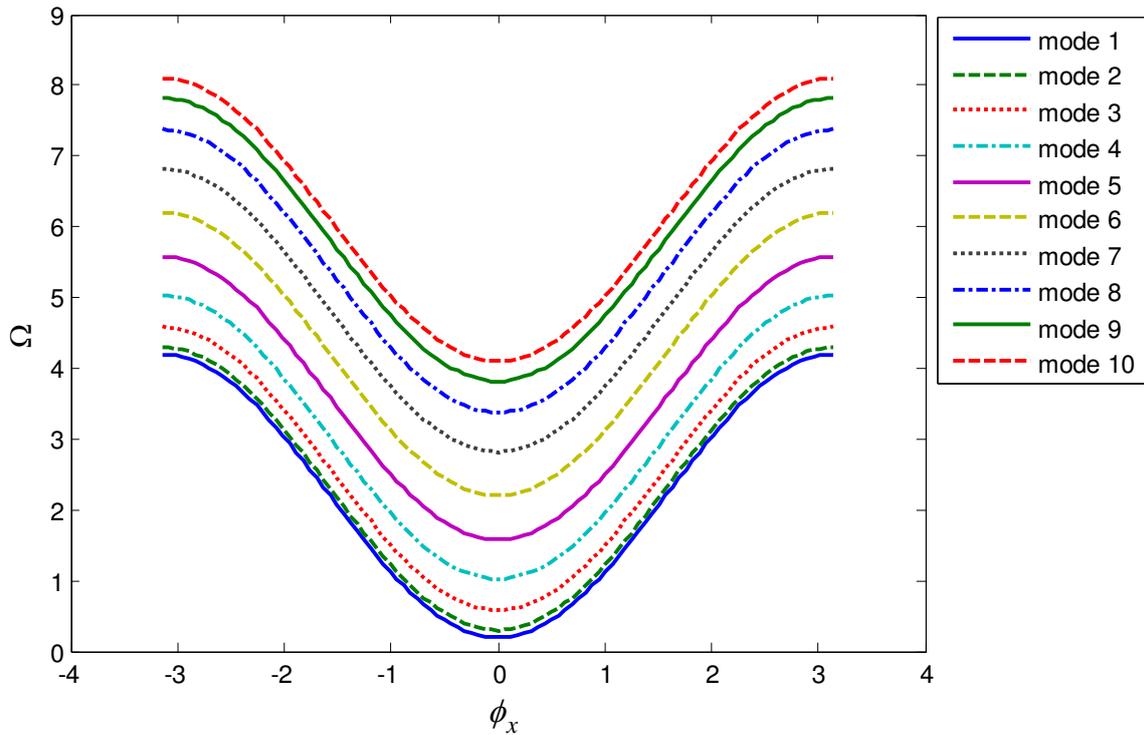


Figure (2.5) : Impact de l'anisotropie de surface sur la dispersion de magnons, dans un film composite à dix plans parallèles. Nous simulons le cas où l'anisotropie est de l'ordre de 10% de l'énergie d'échange ($H_a \approx 10\%J_{pp}$).

Nous constatons que la dispersion de magnons dans le film mince composite est sensible à l'anisotropie des plans de spins. D'ailleurs, sur la figure (2.5), nous remarquons que l'ensemble des modes est affecté. Les modes deviennent énergétiques par rapport au cas où $H_a = 0$. Ceci s'explique par le fait qu'à la surface la coordination des sites est différente de celle des plans intérieurs. Nous signalons que la valeur du champ d'anisotropie varie de 10% à 30% de J_{pp} , dans la littérature.

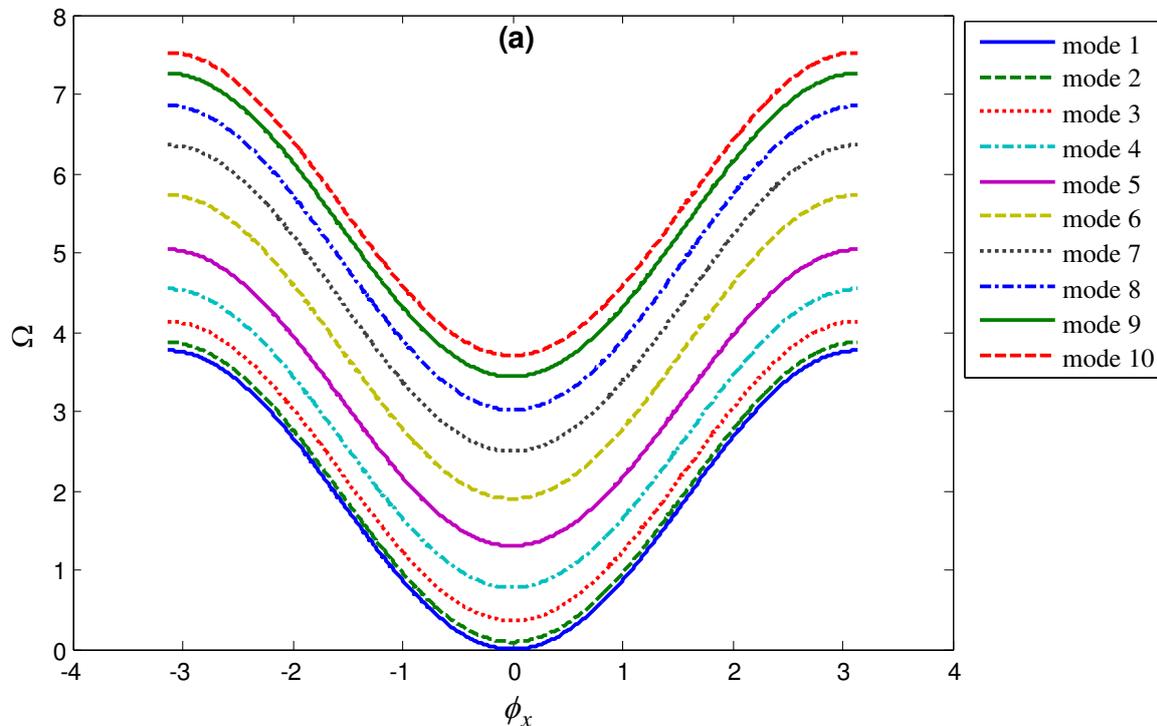
Nous constatons aussi que les intervalles de recouvrement et de chevauchement des modes sont différents par rapport au cas où l'anisotropie est négligée. Les nouvelles plages de propagation des dix (10) modes sont résumées dans le tableau suivant :

Intervalle de propagation	Ω_{\min}	Ω_{\max}
Mode 1	0.20	4.18
Mode 2	0.30	4.29
Mode 3	0.58	4.58
Mode 4	1.03	5.02
Mode 5	1.58	5.58
Mode 6	2.20	6.19
Mode 7	2.81	6.81
Mode 8	3.38	7.37
Mode 9	3.82	7.81
Mode 10	4.10	8.10

Tableau (2.2) : Plages de propagation des différents modes de précession dans une multicouche ferromagnétique composite à deux sites différents, en présence d'une anisotropie.

Lorsque l'anisotropie est prise égale à zéro (négligée), l'énergie de certains modes de précessions se croisent dans des plages bien précise (voir le tableau (2.1)), par contre, quand nous considérons l'anisotropie, nous constatons que les modes se décalent vers les énergies plus élevées par rapport au cas où $H_a = 0$. De plus, les modes se décalent de la même valeur $\Delta\Omega \approx 0.2$.

III.1.5) Effet de l'intensité du spin sur la dispersion de magnon dans un film composite



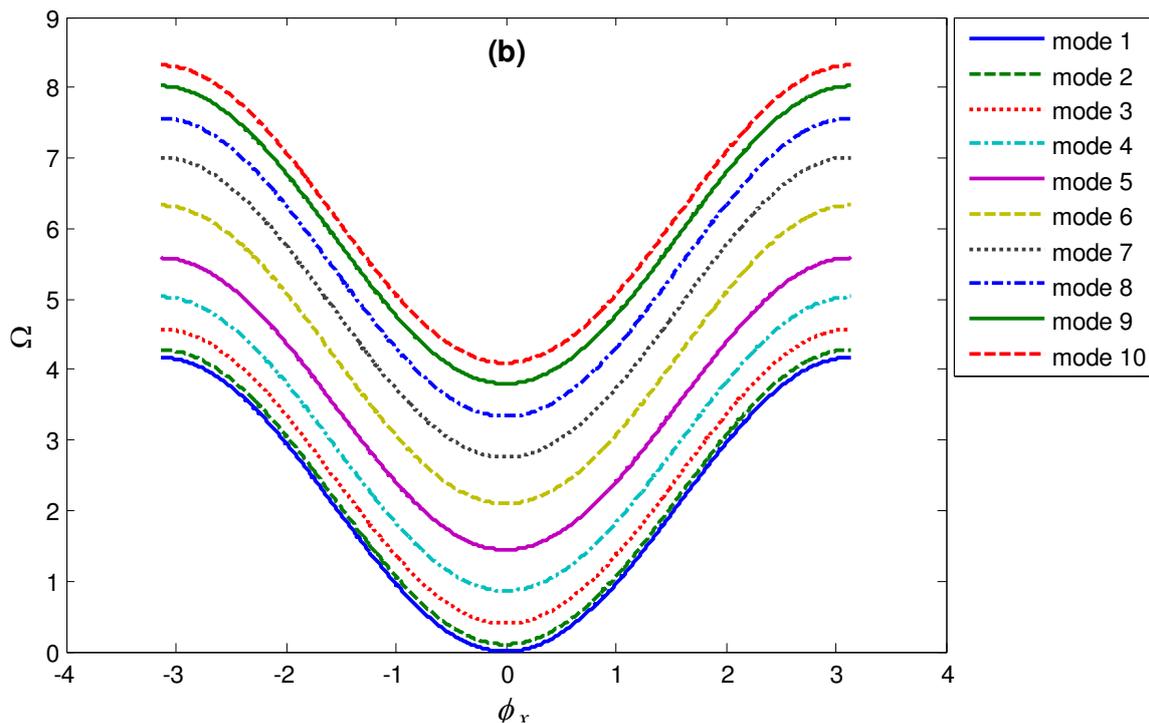


Figure (2.6) : Effet de l'intensité du spin sur la dispersion de magnons dans un film composite à dix plans parallèles.

(a) Pour un rapport d'intensité des spins $S = 0.9$, (b) Pour un rapport $S = 1.1$.

De la figure (2.6), nous remarquons que l'intensité du spin (repérée par le rapport $S = S_B/S_A$) a un impact sur les courbes de dispersion des magnons dans les multicouches composites.

Sur la figure (2.6a), qui correspond au cas où le rapport des intensités des spins $S < 1$ (dans nos simulations, nous avons considéré $S_B < S_A$ et nous avons pris $S = 0.9$).

Dans ce cas, les énergies des modes ont diminué par rapport au cas où les spins des deux monocouches A et B sont similaires $S_B = S_A$ comme présenté sur la figure (2.3).

Sur la figure (2.6b), qui correspond au cas où le rapport des intensités des spins $S > 1$ (dans nos simulations, nous avons considéré $S_B > S_A$ et nous avons pris $S = 1.1$).

Dans ce cas, les énergies des modes se décalent vers les hautes fréquences par rapport au cas où les spins des deux monocouches A et B sont similaires $S_B = S_A$.

Nous notons aussi que l'allure des courbes de dispersion ne reste pas identique à celle du cas où $S = 1$, nous observons aussi un décalage des modes vers les énergies plus élevées ($S > 1$) et vers des énergies basses ($S < 1$). En conclusion, il y a une proportionnalité entre S et la dispersion de magnons.

Dans les deux cas où $S \neq 1$, les intervalles de recouvrement et de chevauchement des modes sont différents par rapport à ceux du cas où $S = 1$. Les nouvelles plages de propagation des dix (10) modes sont résumées dans le tableau suivant :

Intervalle de propagation	Cas où $S < 1$		Cas où $S > 1$	
	Ω_{\min}	Ω_{\max}	Ω_{\min}	Ω_{\max}
Mode 1	0.00	3.76	0.00	4.15
Mode 2	0.09	3.87	0.11	4.28
Mode 3	0.36	4.13	0.40	4.57
Mode 4	0.78	4.53	0.86	5.03
Mode 5	1.30	5.03	1.44	5.58
Mode 6	1.9	5.73	2.10	6.32
Mode 7	2.43	6.35	2.72	7.01
Mode 8	3.02	6.85	3.34	7.57
Mode 9	3.44	7.26	3.80	8.02
Mode 10	3.71	7.53	4.10	8.31

Tableau (2.3) : Variation des plages de propagation des différents modes de précession dans une multicouche ferromagnétique composite à deux sites différents, en fonction de l'intensité du spin.

Au finale, nous concluons que le comportement des ondes de spin est fortement impacté par l'angle d'incidence et l'intensité des spins des monocouches qui constituent le film, par contre, la présence de l'anisotropie ne change pas l'allure des courbes de dispersion, mais elle les décale uniquement vers les hautes énergies.

III.2) Dispersion de phonons dans les multicouches composites

Le modèle du réseau atomique statique a échoué dans le traitement de beaucoup de faits expérimentaux. Les échecs se classent en trois catégories :

- i) Echec dans l'explication des propriétés d'équilibre (origine de la chaleur spécifique du réseau, l'existence de la dilatation).
- ii) Echec dans l'explication des propriétés du transport (conductivité thermique des isolants, transmission du son par les solides).
- iii) Echec de l'explication de l'interaction rayonnement-matière (réflectivité des cristaux ioniques, diffusion des neutrons).

Les échecs cités précédemment ont conduit à l'abandon du modèle statique et à considérer que les atomes qui constituent les matériaux ne sont plus statiques, mais assujettis à des mouvements de faibles amplitudes (vibrations élastiques).

Chaque atome, ion ou molécule est animé d'un mouvement oscillatoire autour d'une position dite d'équilibre. L'étude de la dynamique du réseau consiste à déterminer la fréquence ω de

l'onde vibratoire en fonction de son vecteur d'onde q . L'étude est menée dans le cadre de la théorie de l'approximation harmonique [18]. Cette dernière suppose que les déplacements \vec{u} de chaque atome (ou ion), à partir de la position d'équilibre, se font sur des longueurs petites devant la distance et l'espacement interatomique a .

III.2.1) Structure modèle

Nous traitons le problème des phonons d'une façon similaire au cas précédant (excitation des spins). Le film mince modèle utilisé dans notre approche théorique (analytique et numérique) de la dynamique du réseau atomique possède une épaisseur finie suivant la direction [001].

Il est donc de la forme A/B/A/ .../B. Il est obtenu par l'alternance de deux types de monocouches de spins A et B parallèles jusqu'à une dizaine (voir la figure (2.2)).

III.2.2) Equation du mouvement – Matrice dynamique

Les phonons sont des quasi-particules qui résultent des vibrations atomiques d'un réseau cristallin. Pour étudier le mouvement de ces atomes il faut connaître l'énergie potentielle du système qui dépend de leurs positions instantanées.

Comme les atomes s'éloignent faiblement de leurs positions d'équilibre, leurs déplacements sont petits, alors nous pouvons faire un développement en séries de Taylor autour de la position d'équilibre, par rapport à un vecteur déplacement ($\vec{U}_i = \vec{R}'_i - \vec{R}_i$) lié à un atome donné.

Soit $V = V_0 + V_1 + V_2 + \dots + V_n$ le développement en série de Taylor de l'énergie potentielle, telle que (V_0) est l'énergie du réseau à l'état d'équilibre.

$$V_1 = \sum_{i\alpha} \left(\frac{\partial V}{\partial R'_{i\alpha}} \right) U_{i\alpha} = 0 \quad (2.5)$$

En négligeant tous les termes supérieurs à deux (approximation harmonique) l'expression de V devient

$$V = V_0 + V_2 + \dots \quad (2.6)$$

Telle que

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha, j\beta} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial R'_{i\alpha} \partial R'_{j\beta}} \right) U_{i\alpha} U_{j\beta} \quad (2.7)$$

Où les paramètres α, β désignent les trois directions (Ox), (Oy) et (Oz).

En adoptant la notation suivante $k_{i\alpha,j\beta} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial R'_{i\alpha} \partial R'_{j\beta}} \right)$, ces coefficients sont appelés constantes de force. Ces constantes représentent la force qui agit sur l'atome (i) quand il se déplace suivant la direction α lorsque l'atome (j) se déplace dans la direction β .

En tenant compte des expressions de V_1 et V_2 , l'énergie potentielle prend la forme suivante (à l'ordre de 2),

$$V = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{i\alpha,j\beta} K_{i\alpha,j\beta} U_{i\alpha} U_{j\beta} \quad (2.8)$$

Comme le réseau atomique est dynamique (non statique), la force de rappel entre l'atome i et l'atome voisin $i+j$, (sachant que i est soumis à l'action de tous les atomes j , avec $j \neq i$), est proportionnelle à la différence des déplacements ($u_{i+j} - u_i$), [19], la force résultante s'écrit comme suit

$$\vec{F}_{i\alpha} = - \frac{\partial V_0}{\partial U_{i\alpha}} - \sum_{j\beta} k_{i\alpha,j\beta} U_{j\beta} \quad (2.9)$$

Elle est équivalente à l'écriture suivante aussi

$$F_i = \sum_j k_{ij} (u_{i+j} - u_i) \quad (2.10)$$

La constante (k_{ij}) est la constante de rappel entre le site i et son voisin j .

L'équation du mouvement de l'atome situé au site i est obtenue par application de la deuxième loi de Newton

$$m_i \frac{d^2 u_i}{dt^2} = \sum_j k_{ij} (u_{i+j} - u_i) = \vec{F}_{i\alpha} = - \frac{\partial V_0}{\partial U_{i\alpha}} - \sum_{j\beta} K_{i\alpha,j\beta} U_{j\beta} \quad (2.11)$$

Le facteur (1/2) a disparu, car on compte que les atomes des sites (j).

$$V_0 = cst \Rightarrow \frac{\partial V_0}{\partial U_{i\alpha}} = 0 \Rightarrow \vec{F}_{i\alpha} = - \sum_{j\beta} K_{i\alpha,j\beta} U_{j\beta} \quad (2.12)$$

$$m_i \ddot{u}_{i\alpha} = - \sum_{j\beta} K_{i\alpha,j\beta} U_{j\beta} \Rightarrow \ddot{u}_{i\alpha} = - \sum_{j\beta} D_{i\alpha,j\beta} U_{j\beta} \quad (2.13)$$

C'est une équation différentielle linéaire du second ordre, où m_i représente la masse de l'atome positionné au site (i). La matrice $D_{i\alpha,j\beta} = \frac{K_{i\alpha,j\beta}}{\sqrt{m_i m_j}}$ est appelée matrice dynamique.

L'équation (2.13) admet des solutions sous forme d'ondes planes, exprimée par la relation

$$u_{i\alpha}(t) = u_\alpha \exp[i(\vec{q}_\alpha \vec{R}_i - \omega t)] \quad (2.14)$$

Où (\vec{q}) est le vecteur d'onde, (ω) la pulsation et (t) le temps, (u_α) représente l'amplitude de vibration qui est supposée la même pour tous les atomes.

En injectant la solution dans (2.13), nous obtenons

$$\sum_i (D_{i\alpha,j\beta}(\vec{q}_\alpha) - \omega^2 \delta_{\alpha,\beta}) = 0 \quad (2.15)$$

Ce système n'admet de solution non triviale que si son déterminant est nul.

$$\det |D_{i\alpha,j\beta}(\vec{q}_\alpha) - \omega^2 \delta_{\alpha,\beta}| = 0 \Rightarrow \det |D_{i\alpha,j\beta}(\vec{q}_\alpha) - \omega^2 I| = 0 \quad (2.16)$$

La matrice $D_{i\alpha,j\beta}(\vec{q}_\alpha)$ est une fonction du vecteur d'onde $\vec{q} = \vec{q}_x + \vec{q}_y$. Et I est une matrice identité de même rang que D .

Dans la multicouche composite étudiée dans ce travail de thèse, la cellule unitaire contient dix (10) monocouches parallèles.

Nous dénombrons trois (3) degrés de liberté par site atomique, nous aurons à écrire alors une trentaine d'équations du mouvement. Nous obtenons une matrice dynamique de dimension $D(30 \times 30)$.

Lors de l'écriture des équations, nous avons tenu compte uniquement des interactions entre premiers k_{1AA} , k_{1BB} , k_{1AB} et seconds voisins k_{2AA} , k_{2BB} , k_{2AB} .

En suivant la même démarche que le cas des magnons, nous introduisons les valeurs normalisées comme suit :

- la fréquence normalisée ($\Omega = \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega_0^2}}$), avec ω_0 est la fréquence caractéristique de la multicouche. Elle est exprimée par $\omega_0^2 = \frac{k_{1AA}}{m_A}$ (si on normalise par les grandeurs de la monocouche A), ou bien $\omega_0^2 = \frac{k_{1BB}}{m_B}$, si on normalise par les grandeurs de la monocouche B).

- Les vecteurs d'ondes adimensionnels reliant les sites voisins sont $\varphi_x = q_x a$ et $\varphi_y = q_y a$, respectivement, suivant la direction (Ox) et (Oy) .

Nous appelons facteurs de phases, suivant (Ox) et (Oy) respectivement, les quantités notées par : $Z = e^{j\varphi_x}$ et $e^{j\varphi_y}$.

En tenant compte des notations des grandeurs normalisées, la matrice dynamique est une fonction des variables normalisées, nous écrivons : $D(\Omega, Z, e^{j\varphi_y})$.

II.2.3) Relation de dispersion des phonons

En déterminant les valeurs propres de la matrice dynamique $D(\Omega, Z, e^{j\varphi_y})$, pour $|Z| = 1$, par la diagonalisation, nous obtenons les trente (30) modes propres de vibrations Ω_v et les trente vecteurs propres \vec{u}_v , qui leur sont associés.

La représentation graphique des modes en fonction de φ_x , constitue les courbes de dispersion. Les résultats sont tracés, dans la première zone de Brillouin, sur la figure (2.7).

Dans nos calculs numériques (simulations), nous utilisons des constantes d'interactions normalisées (par rapport à k_{1AA}) :

$$r_{1BB} = k_{1BB}/k_{1AA}, r_{1AB} = k_{1AB}/k_{1AA}, r_{2AA} = k_{2AA}/k_{1AA}, r_{2BB} = k_{2BB}/k_{1AA}, r_{2AB} = k_{2AB}/k_{1AA}.$$

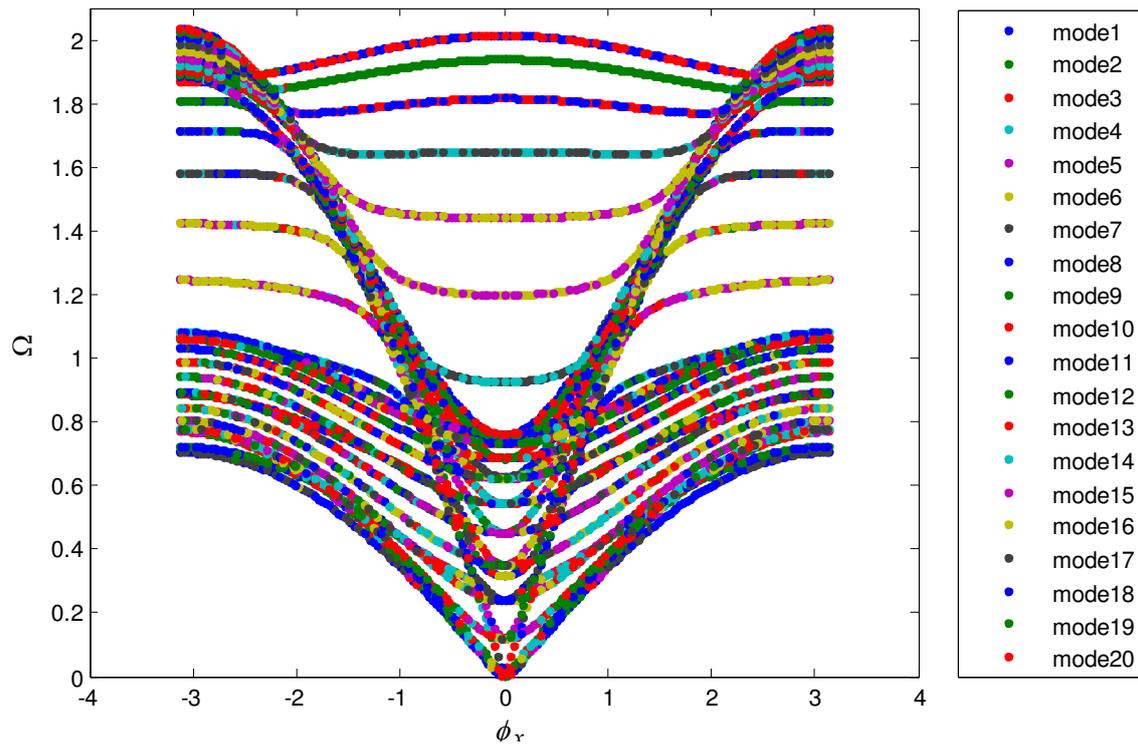


Figure (2.7) : Courbe de dispersion des phonons dans un film mince composite, constitué d'une succession de deux monocouches A et B parallèles jusqu'à dix.

La symétrie du problème étudié par rapport à l'inversion du temps impose la parité des courbes de dispersion par rapport à l'axe des fréquences.

Les résultats obtenus donnent uniquement 20 valeurs propres non nulles. Bien que la matrice dynamique est de taille (30×30) . Les dix autres modes se neutralisent entre eux.

Certains modes se chevauchent dans des plages de fréquences bien précises. Nous constatons qu'il ya seulement trois (3) modes acoustiques (leur fréquence tend vers zéro, $\Omega \rightarrow 0$, quand le vecteur d'onde $q_x \rightarrow 0$). Par contre, les dix-sept (17) autres modes sont optiques. Nous signalons que dans un mode optique, deux atomes différents adjacents se déplacent l'un contre l'autre, tandis que dans un mode acoustique, ils se déplacent ensemble dans le même sens.

En règle générale, l'information contenue dans les courbes de dispersion n'est pas suffisante pour décrire entièrement les modes vibratoires ; il faut connaître aussi les vecteurs propres. Or, ces derniers possèdent une propriété intéressante : ils sont soit symétriques soit antisymétriques. Cette propriété des modes a une conséquence directe sur les relations de dispersions, deux branches de même symétrie ne se croisent jamais.

La présence d'anti-croisement sur la figure (2.7) signifie que les branches sont symétriques.

Les courbes de dispersion peuvent être considérées comme donnant le spectre des énergies possibles pour les phonons en fonction de leur impulsion $\hbar(\vec{q}_x a)$. La connaissance d'un tel spectre, pour un cristal réel, est très importante. Il permet de préciser les énergies et les impulsions que le cristal est susceptible de fournir ou d'absorber lorsqu'il interagit avec un autre système.

Vu le nombre de modes et l'impossibilité de trier les valeurs des facteurs de phase, il est très difficile (voir impossible) d'identifier les limites de propagation de chaque mode de vibration. Nous remarquons aussi l'existence des zones où certaines courbes ont une dérivée négative. Cette dernière a une interprétation physique simple : il s'agit de la vitesse de groupe de l'onde (que nous allons aborder dans le paragraphe IV). Une inversion du signe de la dérivée signifierait que l'onde change de sens de propagation. Cette particularité semble être liée à des problèmes d'instabilités ainsi que la largeur finie de la structure suivant la direction (Oz).

III.2.4) Phonons acoustiques

Les phonons acoustiques sont définis comme étant des mouvements cohérents d'atomes du réseau hors de leurs positions d'équilibre.

Si le déplacement est dans le sens de la propagation, alors dans certaines zones, les atomes seront plus proches, dans d'autres plus éloignés, comme dans une onde sonore dans l'air (d'où le nom acoustique). Le déplacement perpendiculaire à la direction de propagation est comparable aux ondes sur une corde. Si la longueur d'onde des phonons acoustiques va à l'infini, cela correspond à un simple déplacement du cristal entier, et cela ne nécessite aucune énergie de déformation.

Aux faibles valeurs de q (c'est-à-dire aux grandes longueurs d'onde), la relation de dispersion est presque linéaire et la vitesse du son est d'environ ($v \approx \omega a$), indépendante de la fréquence des phonons. En conséquence, des paquets de phonons avec des longueurs d'onde différentes (mais longues) peuvent se propager sur de grandes distances à travers le réseau atomique sans se rompre. C'est la raison pour laquelle le son se propage à travers les solides sans distorsion significative. Ce comportement échoue aux grandes valeurs de q , c'est-à-dire aux courtes longueurs d'onde, en raison des détails microscopiques du réseau.

Les fréquences des phonons acoustiques ont tendance à être nulles avec une longueur d'onde plus longue. Les phonons acoustiques longitudinaux et transversaux sont souvent abrégés, respectivement, en phonons LA et TA.

III.2.5) Phonons optiques

Les phonons optiques sont obtenus lorsque les mouvements des atomes sont déphasés dans le réseau atomique. On parle de déphasage quand un atome se déplace vers la gauche et son voisin vers la droite. Cela se produit si la base du réseau se compose de deux atomes ou plus. Ils sont appelés *optiques* car dans les cristaux ioniques (par exemple NaCl), les fluctuations de déplacement créent une polarisation électrique qui se couple au champ électromagnétique [20]. Par conséquent, l'excitation des cristaux ioniques peut être assurée par un rayonnement infrarouge [21]. Dans ces cristaux, le champ électrique de la lumière déplacera chaque cation (ion positif) dans la direction du champ, et chaque anion (ion négatif) dans l'autre direction, faisant ainsi vibrer le cristal.

Les phonons optiques sont caractérisés par une fréquence non nulle au centre de la zone de Brillouin et ne présentent aucune dispersion près de cette limite de longueur d'onde.

En effet, ils correspondent à un mode de vibration où les ions positifs et négatifs des sites de réseau adjacents se balancent les uns contre les autres, créant un moment dipolaire électrique variant dans le temps. Les phonons optiques qui interagissent de cette manière avec la lumière sont appelés *infrarouges actifs*. Les phonons optiques qui sont *Raman actifs* peuvent également interagir indirectement avec la lumière, par diffusion Raman.

Les phonons optiques sont souvent abrégés en phonons LO et TO, pour les modes longitudinal et transverse, respectivement, la division entre les fréquences LO et TO est souvent décrite avec précision par la relation Lyddane – Sachs – Teller.

Lors de la mesure expérimentale de l'énergie des phonons optiques, les fréquences des phonons optiques sont parfois données en notation spectroscopique en nombre d'ondes, où le symbole ω représente la fréquence ordinaire (et non la fréquence angulaire), et est exprimée en unités de cm^{-1} . La valeur est obtenue en divisant la fréquence par la vitesse de la lumière dans le vide. En d'autres termes, le nombre d'onde en unités cm^{-1} correspond à l'inverse de la longueur d'onde d'un photon dans le vide, qui a la même fréquence que le phonon mesuré.

IV) Vitesse du groupe

La vitesse de groupe associée à une onde (élastique ou de spin) dans un guide d'onde est par définition la vitesse de propagation du paquet d'onde. Elle correspond notamment à la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans le milieu de déplacement.

Elle est définie pour des valeurs du vecteur d'ondes \vec{q} réelles. Elle est donnée par l'expression

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q}, \text{ soit } \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \quad (2.17)$$

Si le vecteur d'onde \vec{q} est différent d'un réel, nous imposons $v_g = 0$.

En parallèle, nous rappelons que pour déterminer les vitesses de groupe, deux méthodes différentes peuvent être utilisées : (i) la méthode des différences finies, ou (ii) la méthode perturbative [22-23].

Dans les deux méthodes, on doit passer par la résolution d'un problème aux valeurs propres du guide d'ondes parfait

$$D(\vec{q})\vec{u} = -\Omega(\vec{q})\vec{u} \quad (2.18a)$$

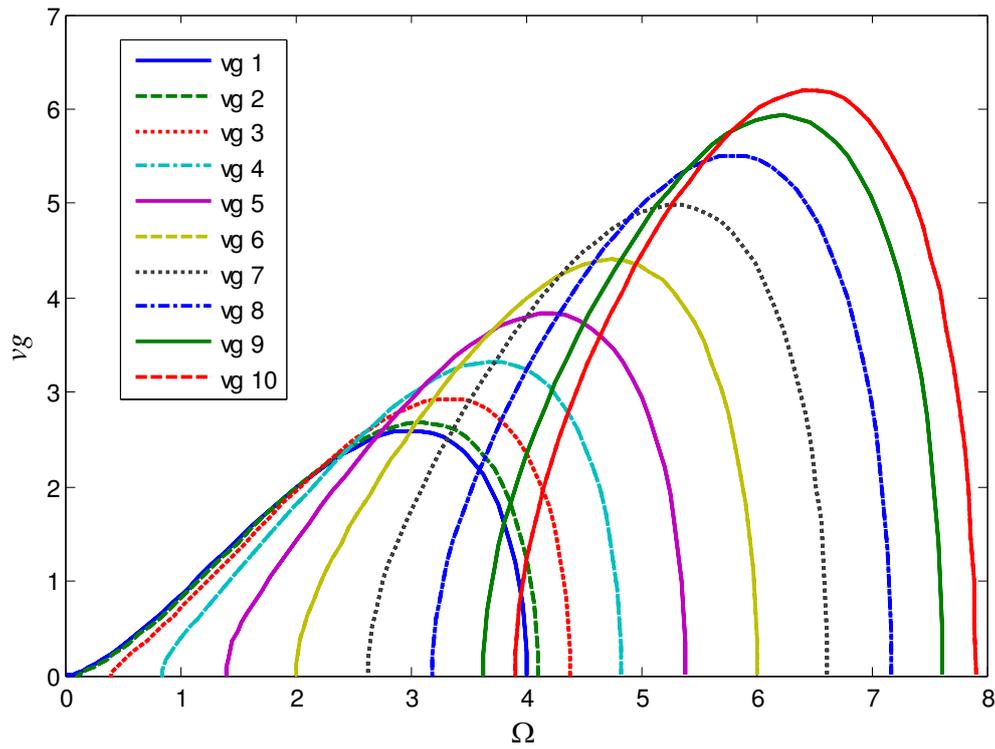
$$D(\vec{q})\vec{u} = -\Omega^2(\vec{q})\vec{u} \quad (2.18b)$$

L'équation (2.18a) est relative aux ondes de spin, tandis que la deuxième (2.18b) décrit la dynamique du réseau (ondes élastiques).

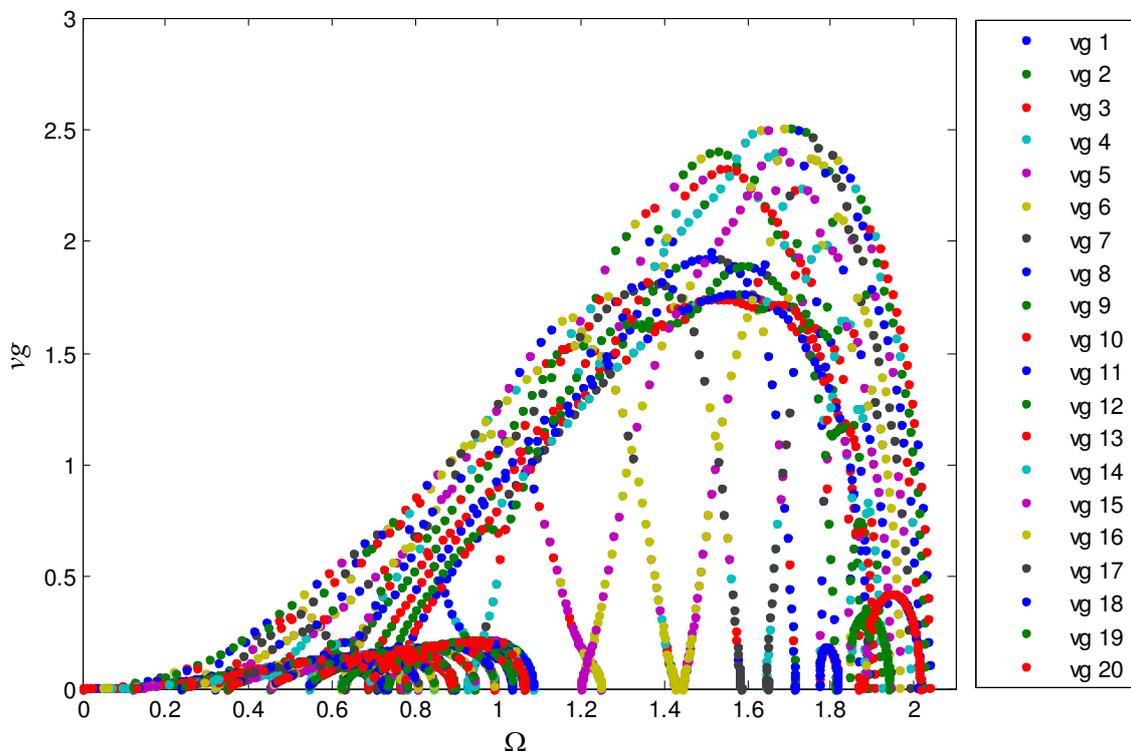
Dans ce présent travail de thèse, nous avons opté pour la méthode perturbative afin de déterminer les vitesses. Elle consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation (2.18) et l'équation de Schrödinger stationnaire $H\psi = E\psi$, portant sur les perturbations indépendantes du temps.

Les éléments des matrices des vitesses sont obtenus en dérivant les éléments des matrices dynamiques D par rapport au facteur de phase Z .

L'allure de la vitesse de groupe v_g , en fonction de la fréquence normalisée Ω de diffusion, dans les différents modes de précession (pour le cas des magnons) et de vibration (dans le cas des phonons) sont tracées sur les figures (2.8) et (2.9).



Figure(2.8) : Vitesses de groupe liées à l'onde de spin dans les dix modes de précession, dans la multicouche ferromagnétique en fonction de Ω .



Figure(2.9) : Vitesses de groupe liées à l'onde élastique dans les modes de phonons dans la multicouche à dix plans parallèles, en fonction de Ω .

Sur la figure (2.8), les dix branches relatives aux dix modes de précessions évoluent globalement avec la même allure. Elles montrent des intervalles où les vitesses des différents modes se recouvrent. Ceci signifie que les modes sont excités et se propagent en même temps. Les courbes de vitesses de groupe peuvent être obtenues en calculant les pentes des tangentes aux courbes de dispersion. Quand la pente est négative, elle signifie que l'onde change de sens de propagation.

Les courbes des vitesses de groupe sont importantes à calculer du fait qu'elles interviennent dans la normalisation des coefficients de transmission et de réflexion ainsi que les transmittance (diffusion via les inhomogénéités géométriques ou structurelles), que nous allons déterminer dans le prochain chapitre.

Sur la figure (2.9), les calculs numériques donnent les branches relatives aux courbes de dispersion des phonons. Vu la complexité du problème (difficulté de trier), nous ne pouvons pas visualiser les choses comme la figure (2.8). Par contre, les propriétés observées restent valables aussi.

V) Les modes évanescents

Pour décrire le phénomène de propagation d'ondes (diffusion en présence de différents types inhomogénéités), nous n'avons pas seulement à connaître les modes propageants définis précédemment (pour $|Z| = 1$), mais aussi à considérer les solutions évanescentes du système.

En d'autres termes, pour une fréquence Ω donnée, nous avons besoin de toutes les solutions Z , même celles dont le module inférieur à l'unité ($|Z| < 1$). Par contre, il faut écarter les solutions pour lesquelles $|Z| > 1$, car elles donnent lieu à des modes divergents.

Calcul des facteurs de phase

Dans un système physique, les zones perturbées couplent les différents modes à la fréquence Ω constante ; il est donc indispensable de prendre celle-ci comme variable indépendante. Nous utilisons la méthode proposée par F. Gagel [24-26] dans nos calculs. La méthode consiste à augmenter la base du système initial.

Les équations (2.3) et (2.15) permettent de trouver les fréquences Ω à Z (ou bien φ_x) fixé.

Pour calculer les facteurs de phases, il faut linéariser le système initial en introduisant de nouvelles variables. On pose

$$\vec{v}_i = -\frac{1}{Z} \vec{u}_j \quad (2.19)$$

$i \in [11, 20]$, pour $j \in [1, 10]$, dans le cas des ondes de spin.

$i \in [31, 60]$, pour $j \in [1, 30]$, dans le cas des ondes élastiques.

Nous obtiendrons des équations supplémentaires, alors le nouveau système contient deux fois plus d'équations que le système original.

$$M(\Omega) \vec{w} = Z.N.\vec{w} \quad (2.20)$$

$$\text{Avec : } \vec{w} = \begin{pmatrix} \vec{u}_j(p) \\ \vec{v}_i(p) \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Notons que M et N sont des matrices extraites de la matrice dynamique $D(\Omega, Z, e^{j\varphi_y})$ après augmentation de la base, leurs tailles sont le double de la matrice dynamique.

La résolution du système (2.20) conduit pour chaque fréquence Ω , à dix paires de valeurs propres $\{Z(i), Z^1(i)\}$ et à dix paires de vecteurs propres qu'il s'agit de trier, dans le cas des magnons. Il conduit à trente paires de valeurs propres $\{Z(i), Z^1(i)\}$ et à trente paires de vecteurs propres à trier, dans le cas des phonons.

VI) Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit brièvement, dans la première partie, les différentes méthodes théoriques disponibles permettant d'examiner le comportement dynamique des structures et de traiter les excitations élémentaires (de types magnons et phonons) dans les dispositifs atomiques et assemblages magnétiques perturbés, à basse température. Nous avons insisté sur la méthode de raccordement, puisqu'elle sera appliquée dans les prochains chapitres

Dans la seconde partie, nous avons rappelé les formalismes théoriques à utiliser pour déterminer et tracer les courbes de dispersion des ondes de spin et des ondes élastiques dans les guides d'ondes parfaits. Un guide d'onde est une multicouche à dix plans parallèles, constituées de succession de deux différentes monocouches A et B. Dans la dernière partie, les vitesses de groupe associées aux différentes modes d'excitation sont également calculées.

Dans le volet consacré à la dynamique de précession des spins, l'influence de l'anisotropie, de la direction d'incidence et de l'intensité des spins est analysée et commentée.

Dans le volet relatif à la dynamique du réseau atomique, la différence entre les modes acoustiques et optiques est rapportée et expliquée.

Références du chapitre 2

- [1] W. Clark, PhD Thesis, University of California, Los Angeles (1965).
- [2] R. Fuchs and K. L. Kliewer, Phys. Rev. 140, A2076 (1965).
- [3] R.E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. de Wette, Phys. Rev. B 4, 1661 (1971) ;
- [4] G.P. Alldredge, R. E. Allen and F. W. de Wette, Phys. Rev. B 4, 1682 (1971).
- [5] G. Green, J. Reine Und Angewandte Maths 39, 73 (1850).
- [6] C. Shen, A. Kahn and J. Schwartz, J. Appl. Phys. 89, 449 (2001).
- [7] J. Szeftel and A. Khater, Phys. Rev. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [8] M. Tamine, J. Magn. Magn. Mat. 153, 366 (1996).
- [9] A. Belayadi, B. Bourahla and F. Mekideche-Chafa, Surf.Rev.Lett. 25, 1850101 (2018).
- [10] L. Ferrah, B. Bourahla and S. Blizak, Spin 11, 2150028 (2021).
- [11] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. 155, 731 (1967).
- [12] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [13] M. Marcus, The College Mathematics Journal 21, 130 (1990).
- [14] L. Néel, C. R. Acad. Sci. Paris, 237, 1468 (1953).
- [15] L. Néel, J. Phys. Rad. 15, 225 (1954).
- [16] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer Verlag (1988).
- [17] J.C. Slater, *Quantum Theory of molecules and solids*, London (1965).
- [18] A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski, *Handbook of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3 Garland, New York (1980).
- [19] C. Kittel. *Physique de l'état solide*. Dunod Eds.(2007).
- [20] V. Vlaminck, CHIRON workshop on "Hybrid Spin Wave Computing", (2022).
- [21] M.D. Losego, M.E. Grady, N.R. Sottos, D.G. Cahill and P.V. Braun, Nat.Mater 11, 252 (2012).
- [22] S. Nicaise, *Analyse numérique et équations aux dérivées partielles*, Dunod, (2000).
- [23] J. Rappaz, M. Picasso, *Introduction à l'analyse numérique*, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1998).
- [24] F. Gagel and K. Maschke, Phys. Rev. B 52, 2013 (1995).
- [25] A. Fellay, Travail d'ingénieur Physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996)
- [26] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, Modern Phys. Lett. B 19, 625 (2005).

CHAPITRE 3

Diffusion des ondes de spins et des ondes élastiques via les inhomogénéités structurelles dans les multicouches composites de type A/B

Sommaire

Introduction

I. Etude de la diffusion de magnons dans les films composites inhomogènes

I.1. Matrice dynamique du film perturbé

I.2. Matrice de raccordement correspondante

I.3 Diffusion phononique et magnonique à travers les inhomogénéités

I.4. Conductance (transmittance) magnonique et phononique

II. Diffusion des magnons dans les films composites A/B en présence de défauts

II.1. Diffusion des magnons à travers les zones de cisaillement

II.1.1. Multicouche modèle étudiée

II.1.2. Résultats obtenus dans le cas des défauts de cisaillement

II.1.3. Interprétation des résultats obtenus dans le cas du cisaillement

II.2. Diffusion de magnons dans les films composites en présence de défauts lacunaires

II.2.1. Résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires

II.2.2. Interprétation des résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires

III. Conductances (transmittances) phononiques

III.1. Résultats des spectres de conductance

III.1.1. Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 45°

III.1.2. Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 30°

III.1.3. Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes au centre du film

III.1.4. Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes aux extrémités du film

III.2. Interprétation des résultats obtenus des conductances phononiques

IV. Conclusion

Références du chapitre 3

Introduction

Malgré les progrès enregistrés dans les techniques de préparation et d'élaboration des matériaux, ces derniers présentent inévitablement des défauts ponctuels et structuraux [1-4] qui peuvent jouer un rôle prépondérant dans le transport électronique [5-7], optique [8-10], phononique [11-13] et magnonique [14-16]. Leur étude pose des problèmes théoriques compliqués à résoudre, qui sont liés essentiellement à la brisure de symétrie.

Afin de relever l'impact de ces défauts sur les ondes de précession des spins et les ondes de vibrations des phonons, dans les matériaux composite A/B étudiés au chapitre précédent, nous avons consacré ce chapitre à utiliser l'approche théorique de R. Landauer [17-19], développée initialement par M. Büttiker pour l'étude du transport électrique dans les systèmes mésoscopiques [20-22]. L'approche est associée à la méthode de raccordement [23-25] que nous avons expliqué au chapitre 1, Cela dans le but d'étudier deux importants défauts de structure dans film composites de type A/B, à savoir les défauts de cisaillement et les défauts de lacunes.

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons calculé et représenté la transmission, la réflexion des ondes de spin dans ce type de systèmes. Dans la deuxième partie, nous nous sommes intéressés à l'étude de la conductance phononiques dans des matériaux composites.

I) Etude de la diffusion des magnons dans les films inhomogènes

Notre méthode est basée sur la méthode de raccordement qui consiste à diviser chacun des systèmes en trois zones, les zones de gauche et de droite représentent le système parfait étudié au chapitre 2 (représenté sur la figure (2.1)).

La zone de défaut qui correspond à la partie contenant les sites cisailés ou les lacunes, et les zones de raccordement sont celles qui relient les deux zones précédentes. Les deux régions de raccordement sont définies par les sites atomiques séparant la zone de défaut avec les deux autres zones parfaites.

I.1) Matrice dynamique du film perturbé

La matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement des spins/atomes de la zone du de défaut et celles des spins/tomes des deux zones de raccordement se trouvant aux frontières du défaut et les zones parfaites de gauche et de droite, on obtient une matrice rectangulaire $D(m,n)$ appelée matrice dynamique du système perturbé.

La taille de la matrice dépend du nombre d'atomes dans la zone de défaut, notée d'une façon générale $D(m,n)$.

$$\dim(D) = (m \times n) \quad (3.1)$$

Où : m = le nombre de sites dans la zone de défaut.

$n = m$ plus (+) le nombre de sites qui sont reliés directement aux sites des zones de raccordement.

Nous soulignons que dans le cas des phonons, il y a trois (3) degrés de liberté par site, donc, il faut multiplier le nombre de sites par trois.

I.2) Matrice de raccordement correspondante

Le rôle de la matrice de raccordement est de relier analytiquement les déplacements vibrationnels ou processionnels des sites appartenant à la zone de défaut et les champs vibrationnels ou processionnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits de gauche et de droite.

Pour cela, nous allons représenter les déplacements atomiques ou la précession des spins par une combinaison linéaire des vecteurs $\{R, T\}$ définissant un espace fini.

Dans de notre travail, il y a deux zones de raccordements (gauche et droite) par rapport à la zone de défaut. Nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$; la première sera utilisée pour l'étude du mouvement des sites se trouvant à gauche du défaut, et la deuxième base est utilisée pour l'étude de la dynamique des sites se trouvant à sa droite.

Les dimensions des vecteurs de bases définis sont liées au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de la multicouche parfaite, ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimensions dix (10), dans le cas des magnons, et de trente (30), dans le cas des phonons.

Pour un site (atomique ou de spin) de la région de raccordement à droite, on peut écrire les déplacements et les amplitudes de précession de la manière suivante

$$u'_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{j=1}^v Z_j^{n_x} A'(\alpha, j) T_j \quad (3.2)$$

$$u_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{i=1}^v Z_i^{n_x} A(\alpha, j) R_i \quad (3.3)$$

R_i : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R\}$ de l'espace des phases. Le symbole v désigne le nombre de modes.

T_j : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans la base $\{T\}$ de l'espace des phases.

α : est l'une des trois directions cartésiennes (Ox), (Oy) ou (Oz).

A et A' : sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

Le vecteur des amplitudes (de pression ou de vibration) de la zone nano-contact est noté $|u\rangle$.

On peut le décomposer en deux parties :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

i) La partie $|irr\rangle$ est constituée des déplacements des sites irréductibles formants la zone de défaut, et la $\dim(|irr\rangle) =$ au nombre de sites de la zone de défaut dans le cas des magnons et multiplier par trois (3) degrés de libertés par site dans le cas des phonons.

ii) La partie $|rac\rangle$ est composée des déplacements des sites des deux zones de raccordements (gauche et droite). La $\dim(|rac\rangle) =$ au nombre de sites de raccordement multiplier par le nombre de degrés de libertés par site.

On peut alors écrire le raccordement des sites à l'aide de l'expression suivante

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ R \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Avec : I_d est une matrice identité. Sa taille dépend du nombre de sites irréductibles dans le cas des magnons. Elle est multipliée par trois (3 degrés de libertés par site), dans le cas des phonons. Les matrices R_1 , R_2 , R_3 et R_4 : sont des sous matrices carrées, qui dépendent du nombre de modes propageant du système parfait, leurs dimensions pour les magnons (10×10) et (30×30) pour les phonons. Elles sont exprimées en fonctions des Z_i (Z_1, \dots, Z_{10}), dans le cas des magnons et Z_i (Z_1, \dots, Z_{30}), dans le cas des phonons. Ces derniers sont les poids pondérés associés aux modes dits aussi cofacteurs.

D_R : est appelé matrice de raccordement, ses dimensions sont notées ($n \times m$).

Le produit de la matrice D_p par la matrice D_R donne une matrice carrée $D(m \times m)$.

$$D(m \times m) = [D_p(m \times n)] \cdot [D_R(n \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [D(m \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (3.6)$$

Les états vibrationnels ou processionnels induits par l'existence de défauts sont déterminés par la relation de compatibilité suivante

$$\det([D(m \times m)]) = 0 \quad (3.7)$$

I.3) Diffusion phononique et magnonique à travers les inhomogénéités

Nous considérons un mode propageant de gauche à droite i ($|Z_i| = 1$), l'onde résultante diffusée par le défaut que ce soit dans le cas des phonons ou dans le cas des magnons due au cisaillement ou aux lacunes se décompose en deux parties ; une onde transmise qui se propage dans le côté droit du film composite et une autre réfléchiée se propage dans le côté gauche.

Cela donne naissance à un champ d'amplitude (processionnel ou de vibration) dans les deux demi-systèmes.

Les déplacements atomiques ou les amplitudes de précession des spins, dans une direction donnée (par exemple à gauche du nano-contact), peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres ν de vibration ou de précession du guide d'ondes parfait à la même fréquence

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(\alpha, i) \cdot [Z(i)]^{n_x} + \sum_{i'=1}^{\nu} [Z(i')]^{-n_x} \cdot R_{ii'} \cdot A(\alpha, i') \quad (3.8)$$

Lorsque $n_x < 0$.

De la même façon, les déplacements ou amplitudes des ondes à droite s'expriment par

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1}^{\nu} [Z(j)]^{n_x} \cdot T_{ij} \cdot A'(\alpha, j) \quad (3.9)$$

Lorsque $n_x > 0$.

Les notations $R_{ii'}$ et T_{ij} sont des quantités physiques reliées, respectivement, aux coefficients de réflexion et de transmission, selon les différents modes.

Les coefficients de transmission t_{ij} et de réflexion $r_{ii'}$ peuvent être calculés en prenant le soin de les normaliser à l'aide des vitesses de groupe, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité (la somme des parties réfléchiée et transmise).

Pour une onde incidente (provenant) de gauche et allant vers la droite selon un mode propre i

$$\begin{cases} r_{ii'} = \frac{v_{i'}}{v_i} |R_{ii'}|^2 \\ t_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2 \end{cases} \quad (3.10)$$

Où : v_i représente la vitesse de groupe du mode propre i , est nulle pour les modes évanescents dans les deux guides d'ondes parfaits, respectivement gauche et droit, GOPG et GOPD.

I.4) Conductances(Transmittances) magnoniques et phononiques

Afin de décrire la transmission totale des systèmes perturbés, il est utile de définir par analogie avec la conductance électronique liée aux phénomènes de diffusion [26], les conductances magnonique et phononique du film perturbé, à une fréquence Ω donnée [27-30]. Cette conductance notée $\sigma(\Omega)$ est importante à déterminer du fait qu'elle est accessible expérimentalement et qu'on est capable d'exciter, de détecter et de mesurer les amplitudes de vibrations et de précession, à une fréquence donnée.

La transmittance des films de type multicouches composites est égale à la somme des coefficients de transmission effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence Ω .

Pour les ondes de spins, elle est donnée par la relation

$$\sigma(\Omega) = \sum_{n=1}^{10} t_n \quad (3.11a)$$

Pour les ondes élastiques, elle est donnée par cette relation

$$\sigma(\Omega) = \sum_{n=1}^{30} t_n \quad (3.11b)$$

II) Diffusion des magnons dans les films composites perturbés de type A/B

Dans cette partie nous avons étudié la diffusion des magnons à travers des défauts de structure notamment le cisaillement des plans atomiques et les défauts lacunaires dans les matériaux composites de type A/B.

La diffusion de magnons dans ces matériaux sont étudiées est analysée pour des ondes incidentes se propageant suivant l'axe (Ox) dans le sens positif.

Nous avons étudié l'influence de ces défauts sur les coefficients de transmission/réflexion d'ondes et les conductances magnoniques.

II.1) Diffusion d'ondes de spins à travers les zones de cisaillement

Dans les années 1930, Orowan, Polanyi et Taylor proposèrent que le cisaillement puisse se produire par la propagation de défauts linéaires élémentaires appelés dislocations [31].

Supposons qu'un cisaillement élémentaire d'une distance interatomique se produise uniquement le long d'une partie du plan de cisaillement. La ligne qui sépare la partie qui a été cisailée de celle qui ne l'est pas, est la ligne de dislocation. Elle apparaît ici comme la limite d'un demi-plan atomique qui distorde fortement les plans voisins.

Bien qu'observées dans les cristaux liquides au début du siècle par G. Friedel, il a fallu attendre les années 1950 et l'invention du microscope électronique en transmission pour les observer dans les métaux.

Les inhomogénéités structurelles de type cisaillement ont une importance capitale pour les propriétés physiques des matériaux cristallins. Ces cisaillements sont responsables de la propagation de la déformation plastique [32] dans les matériaux solides. Ils permettent aussi la mise en forme des pièces métalliques. De plus, les déformations des réseaux cristallins, qui sont générés par des glissements et le cisaillement des plans atomiques, facilitent la diffusion des atomes, ils peuvent ainsi créer les nuages de Cottrell. Par conséquent, ils sont à l'origine de la modification des propriétés électroniques des semi-conducteurs.

Dans ce chapitre nous étudions l'influence de ce type de défaut sur la propagation des ondes de spin dans les films minces composites.

II.1.1) Multicouche modèle étudiée

Le modèle est obtenu sous l'effet d'une contrainte de cisaillement appliquée sur la partie droite du film composite parfait étudié au chapitre 2, représenté sur la figure (2.1).

La contrainte exercée induit le déplacement relatif de la partie droite de ce film par rapport à la partie gauche, suivant un plan compact, en formant ainsi un angle (α) entre les deux parties, comme représenté sur la figure (3.1).

Dans cette thèse, nous avons examiné deux cas de cisaillement. Le premier correspond à un angle ($\alpha = 45^\circ$), et le deuxième à un angle ($\alpha = 30^\circ$).

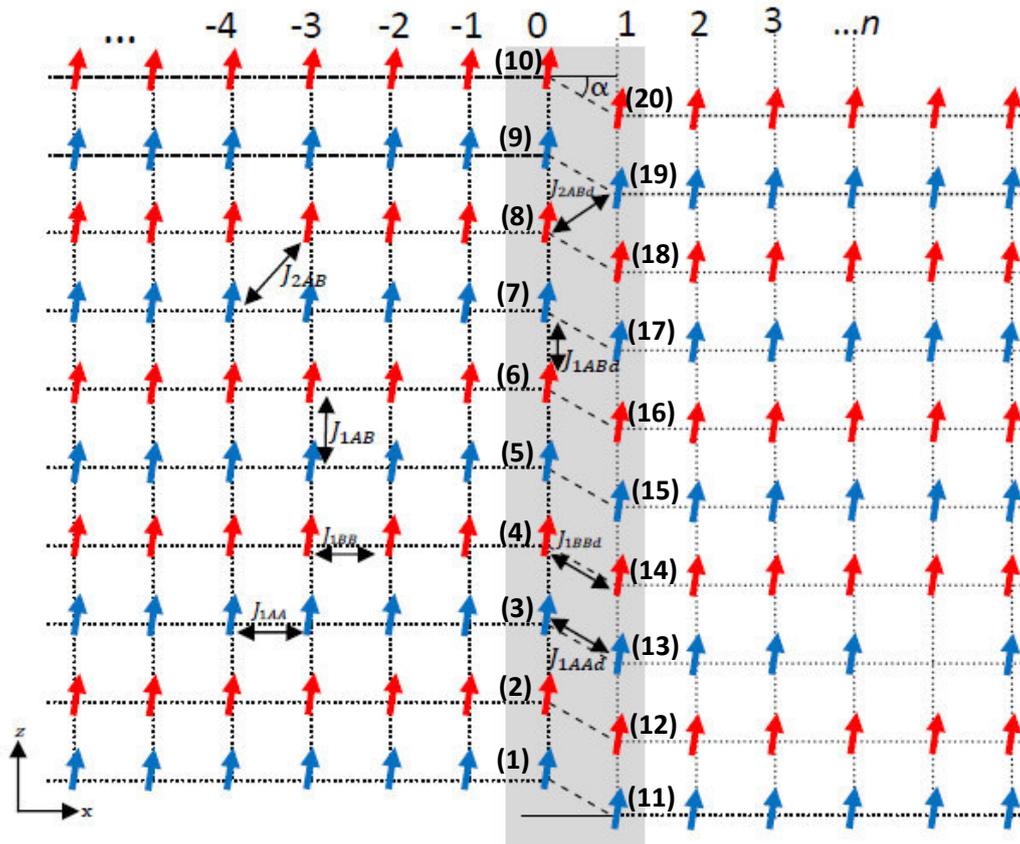


Figure (3.1) : Représentation schématique d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B en présence d'un défaut de cisaillement, suivant le plan (xOz).

II.1.2) Résultats obtenus dans le cas des défauts de cisaillement

i) 1^{er} cas : angle de cisaillement $\alpha = 45^\circ$

Les résultats obtenus pour les coefficients de transmission et de réflexion des ondes de spin, dans le cas du cisaillement à 45° , sont représentés sur les figures ci-dessous. Nous avons considéré trois cas pour les valeurs de $S = S_B/S_A$ et trois possibilités concernant l'intégrale d'échange entre les spins à l'interface des plans de cisaillement.

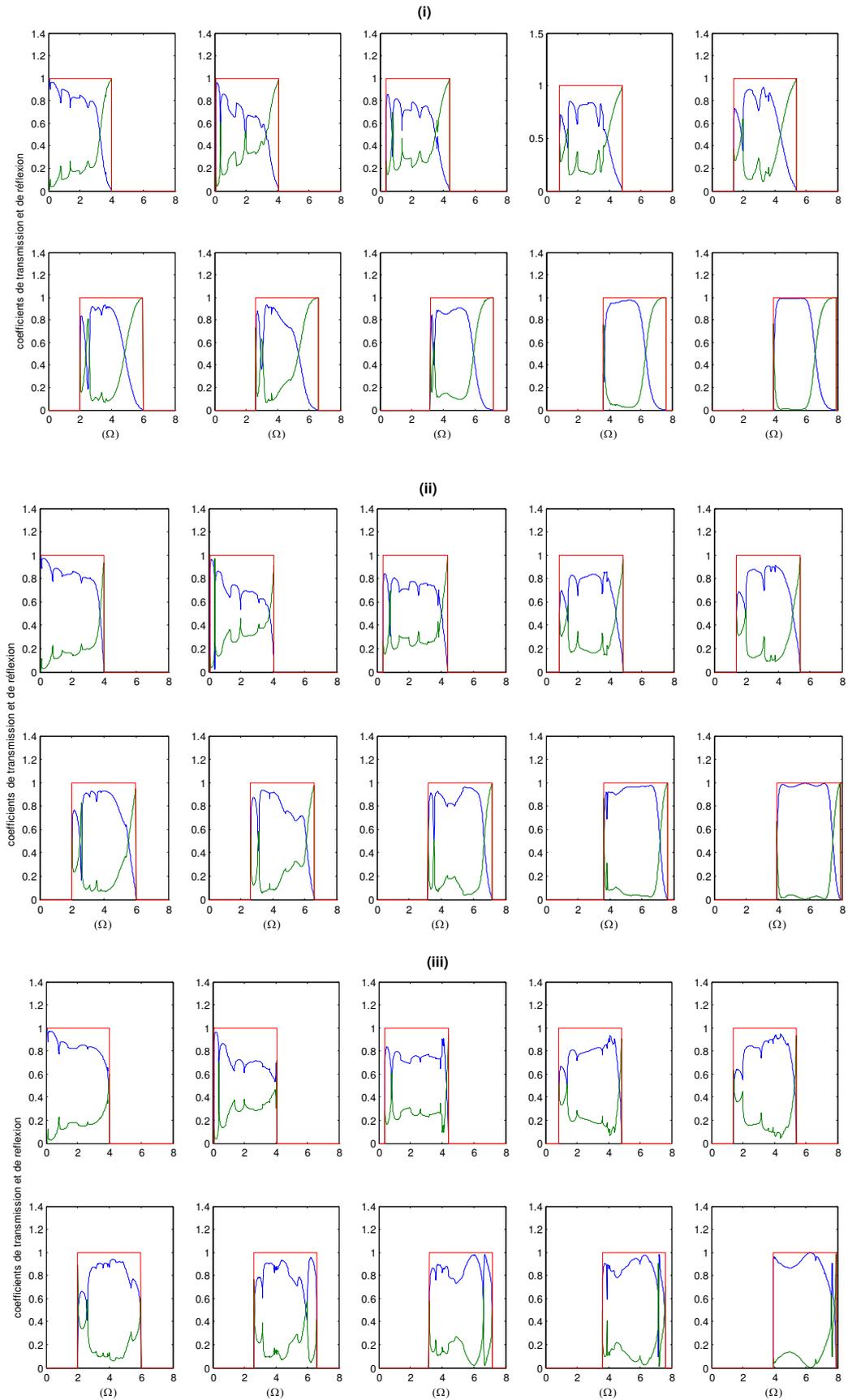


Figure (3.2a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut de cisaillement avec $\alpha = 45^\circ$, dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S < 1$).

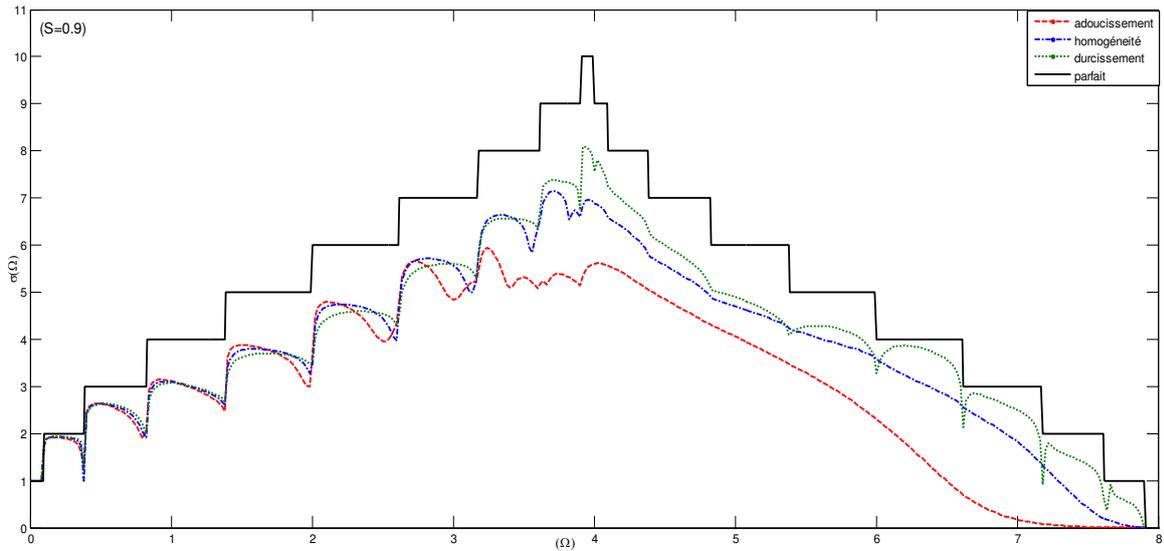
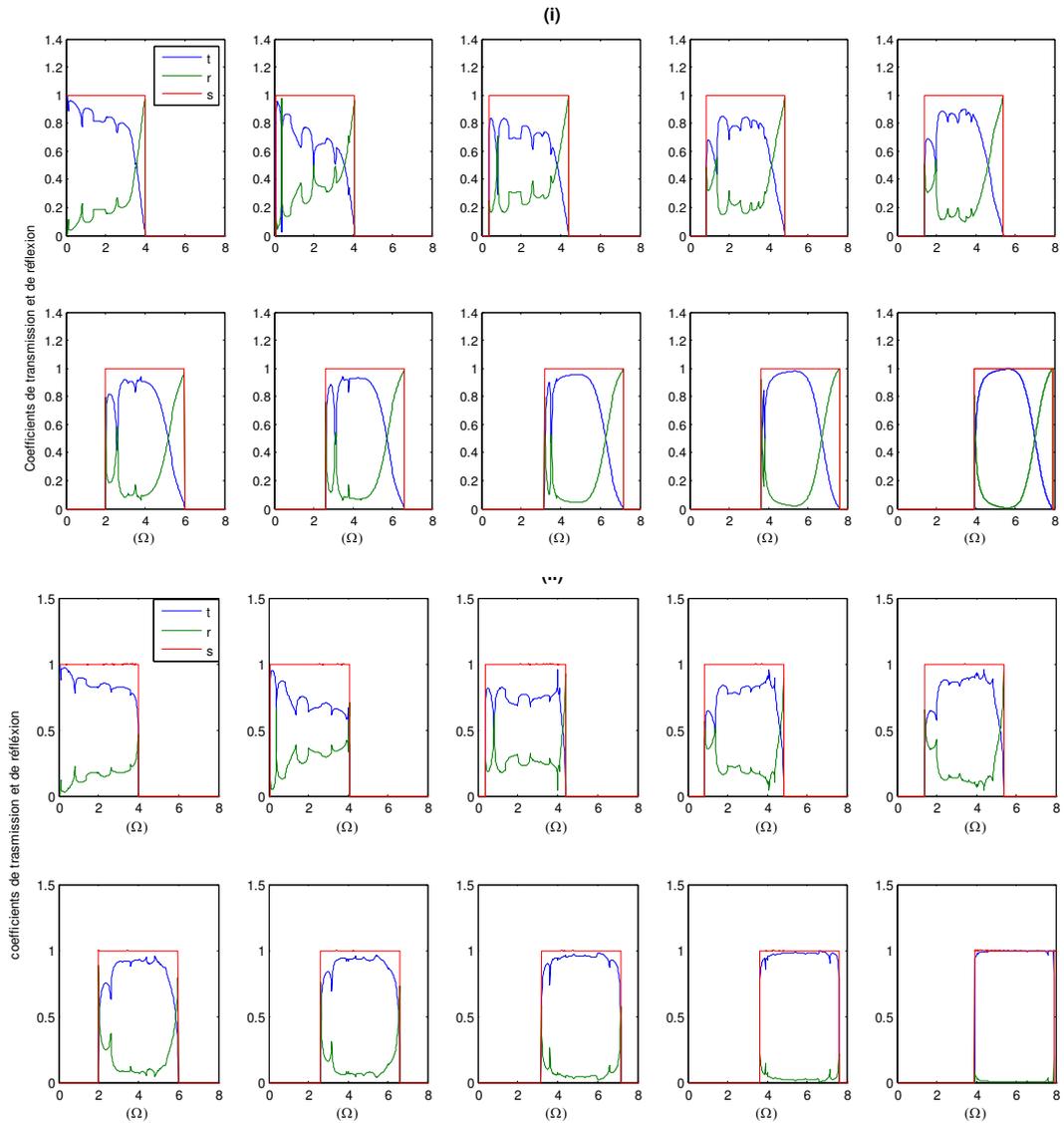


Figure (3.2b) : Conductance magnonique à travers un défaut de cisaillement avec $\alpha = 45^\circ$ dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S < 1$).



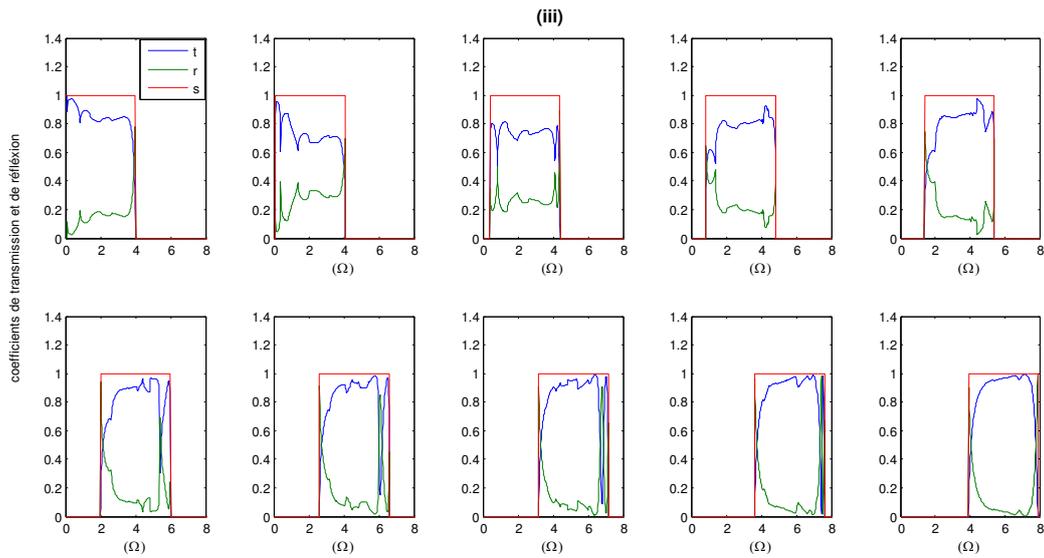


Figure (3.3a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut de cisaillement avec $\alpha = 45$ dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S \approx 1$).

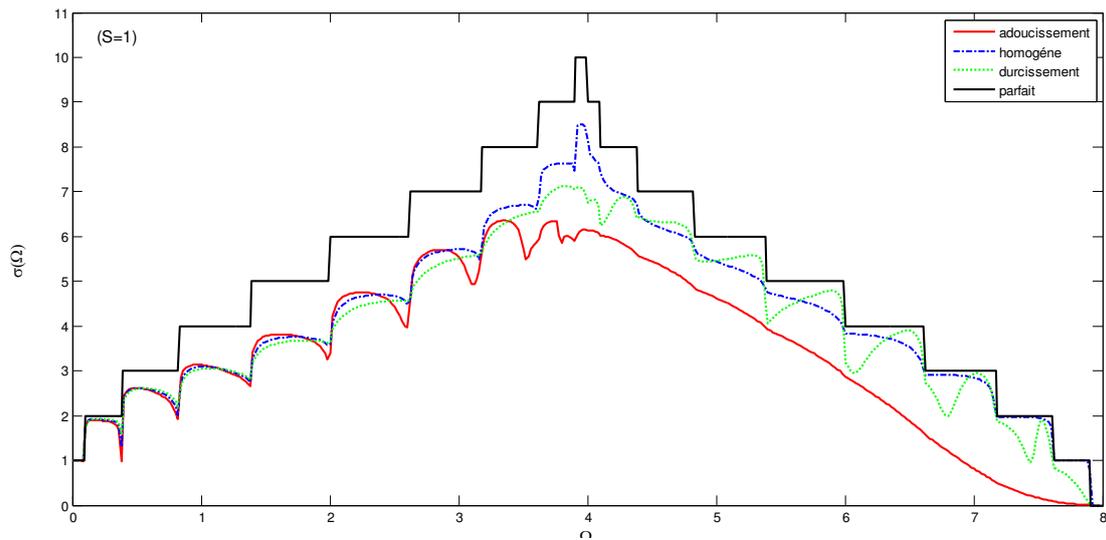


Figure (3.3b) : Conductance magnonique à travers un défaut de cisaillement dans une multicouche composite de type A/B, avec $\alpha = 45^\circ$ (cas où $S \approx 1$).

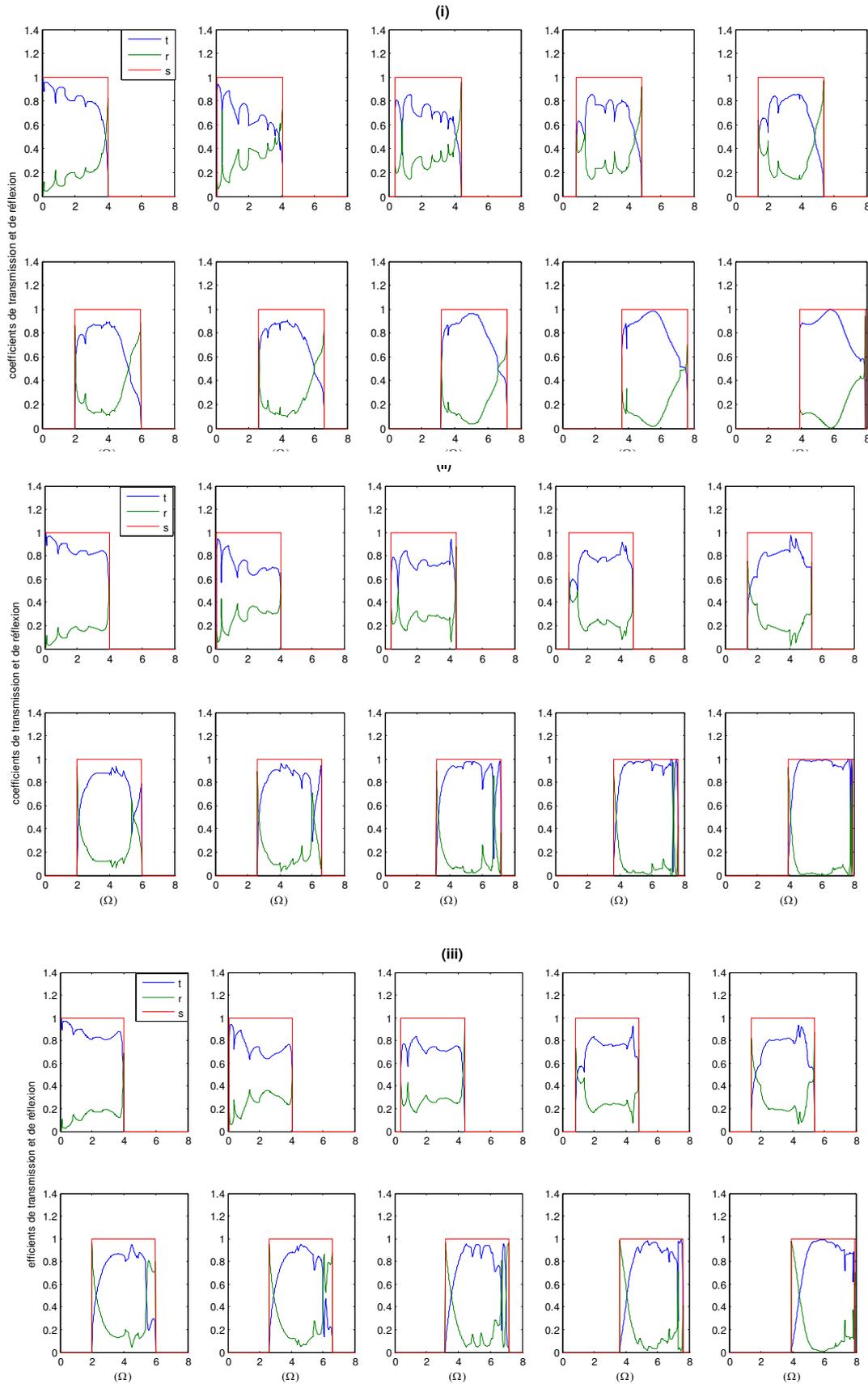


Figure (3.4a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut de cisaillement avec $\alpha = 45^\circ$ des films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 1.1$).

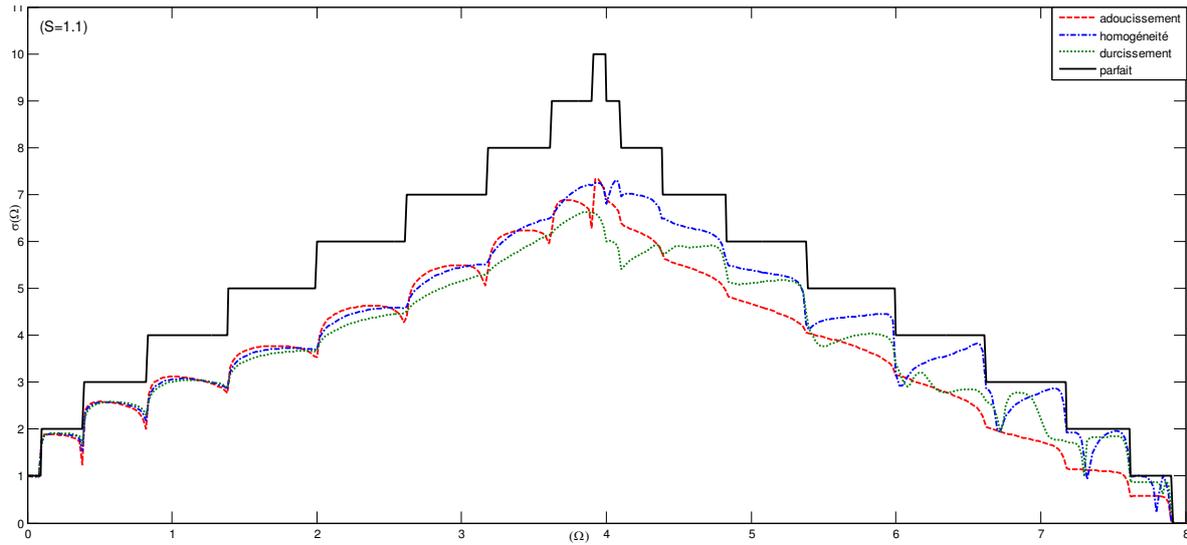
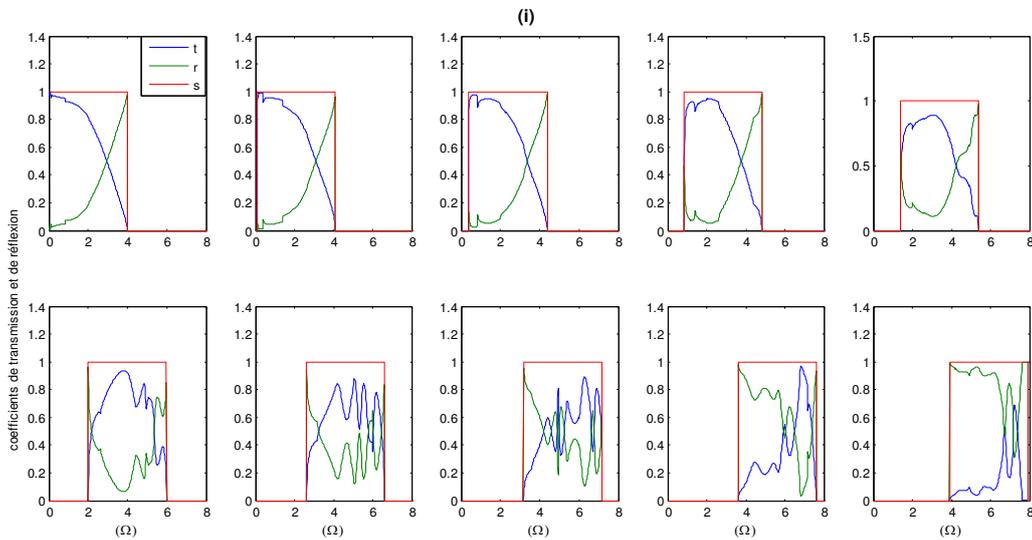


Figure (3.4b) : Conductances magnoniques à travers un défaut de cisaillement avec $\alpha = 45^\circ$ des films minces composites ferromagnétiques de type A/B (cas où $S= 1.1$).

ii) 2^{ème} cas : angle de cisaillement $\alpha = 30^\circ$

Dans le cas de cisaillement à 30° les résultats obtenus pour la réflexion, la transmission et la réflexion sont représentés sur les figures suivantes pour les différentes intensités de spins et les valeurs des intégrales d'échanges magnétiques.



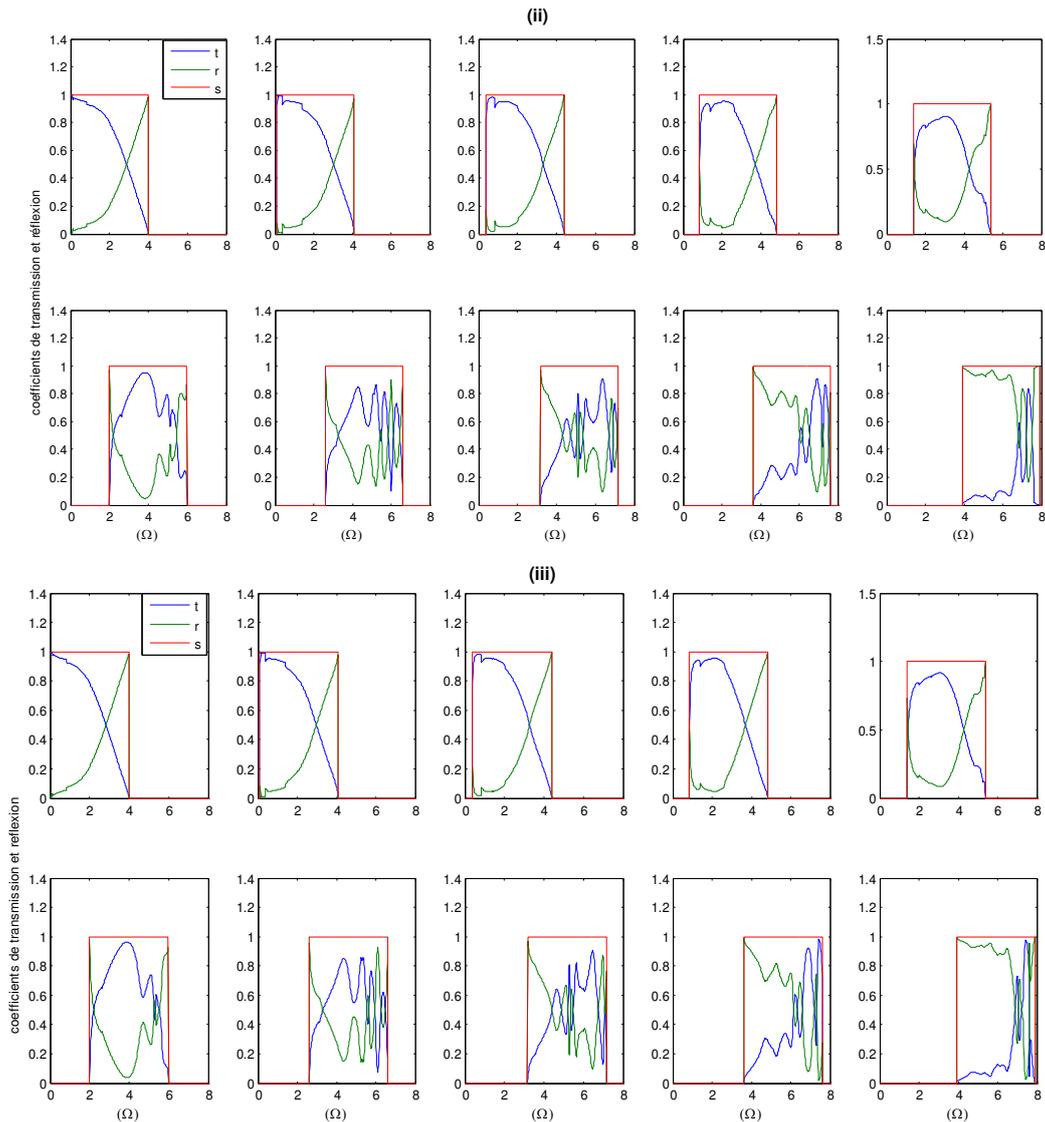


Figure (3.5a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique via un cisaillement $\alpha = 30^\circ$, dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 0.9$).

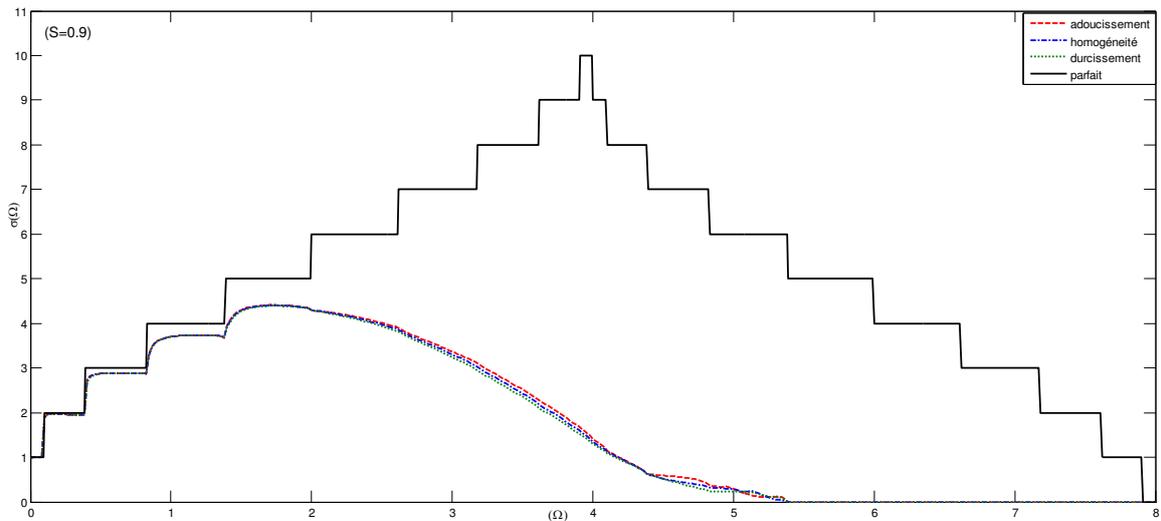


Figure (3.5b) : Conductance magnonique à travers un cisaillement $\alpha = 30^\circ$ dans les films minces composites ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 0.9$).

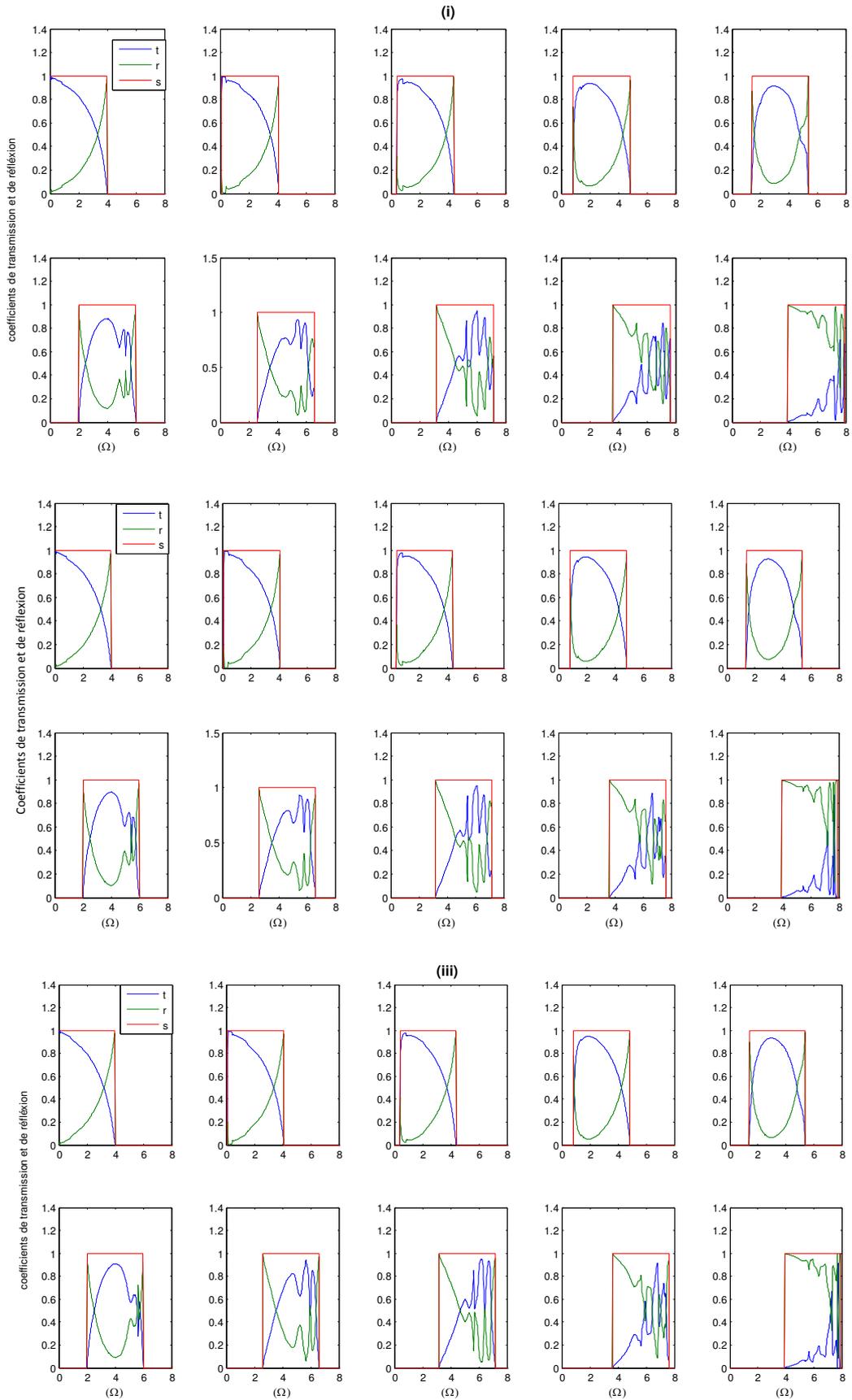


Figure (3.6a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique via un cisaillement $\alpha = 30^\circ$, dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 1.0$).

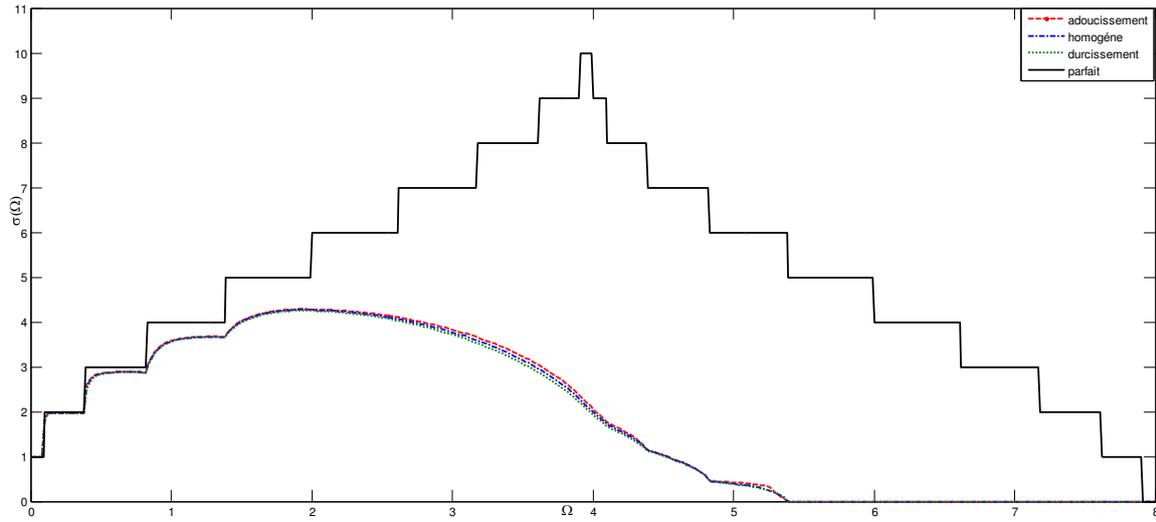
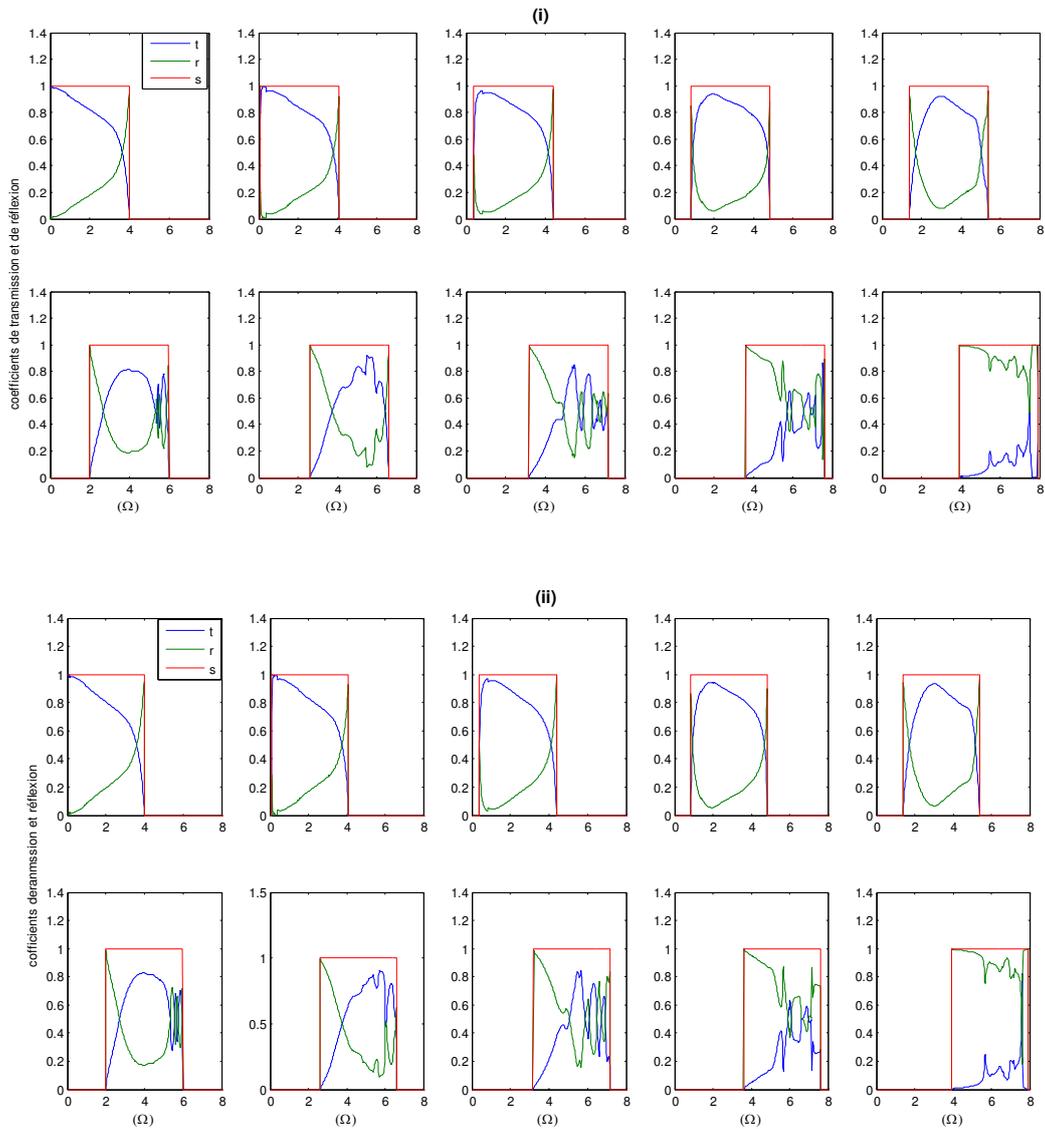


Figure (3.6b) : Conductances magnoniques via un cisaillement $\alpha=30^\circ$ dans les films minces composites ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 1.0$).



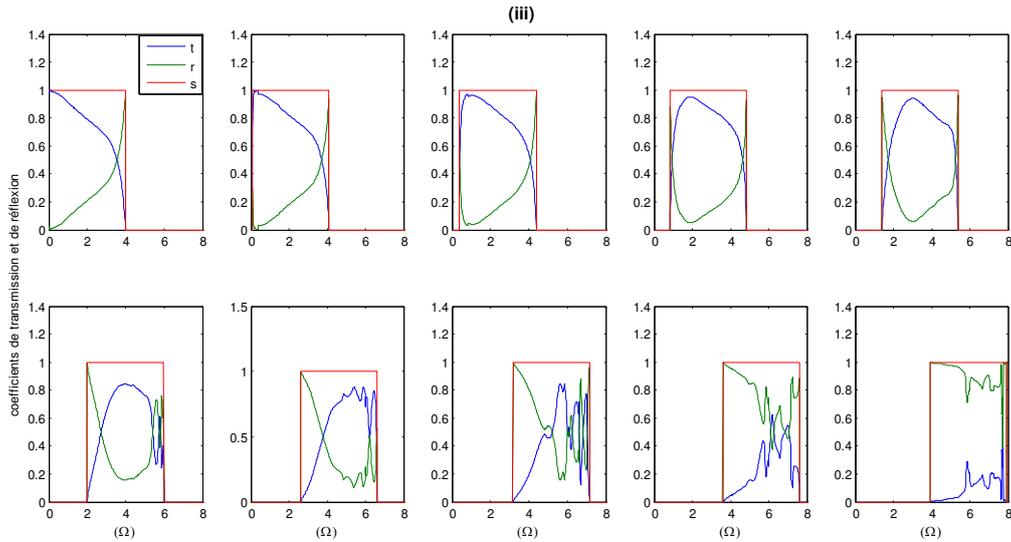


Figure (3.7a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut de cisaillement $\alpha = 30^\circ$ dans les films minces ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 1.1$).

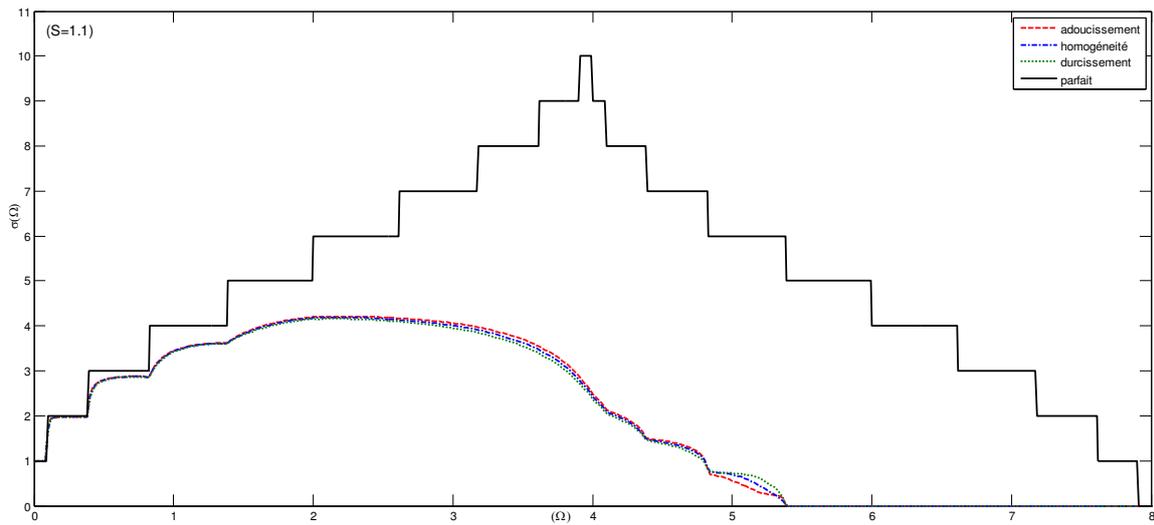


Figure (3.7b) : Conductances magnoniques à travers un défaut de cisaillement $\alpha = 30^\circ$ dans les films minces composites ferromagnétiques de type A/B (cas où $S = 1.1$).

II.1.3) Interprétation des résultats obtenus dans le cas du cisaillement

Nous avons réalisé des simulations pour un choix de trois valeurs de l'intégrale d'échange dans la zone de cisaillement à $J_d/J = 0.9$ pour l'adoucissement, $J_d/J = 1.0$ pour l'homogénéité et $J_d/J = 1.1$ pour le durcissement. Nous avons aussi examiné trois cas de valeurs de spin entre les atomes A et B du système à savoir $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 . nous avons conservé ces valeurs pour tous les systèmes étudiés dans ce chapitre. Nous avons représenté le spectre des coefficients de transmission et de réflexion sur les figures (3.2a), (3.3a) et (3.4a), pour le

cisaillement 45° , respectivement pour $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 . Avec S est le rapport de la valeur du spin des atomes de la zone de défaut (cisaillement) par celui des sites de la zone parfaite. Le calcul a été effectué pour les trois choix de l'échange magnétique dans le domaine du cisaillement par rapport à la structure parfaite. Sur chacune des figures précédentes nous avons représenté trois cas (I) correspond à l'adoucissement $J_d/J = 0.9$; donné par les dix (10) premières courbes, (II) à l'homogénéité ; $J_d/J = 1.0$; donné par les dix (10) deuxième courbes et (III) correspond à $J_d/J = 1.1$; donné par les 10 dernières courbes. Les courbes montrent que le coefficient de transmission est plus important par rapport à celui de la réflexion et cela pour les trois cas de S et les trois cas de J_d/J et presque sur tout l'intervalle de leurs propagation, à l'exception des grandes valeurs Ω surtout dans le cas d'adoucissement ($J_d/J = 0.9$), le coefficient de réflexion devient plus important en passant par un point d'interaction avec celui de la transmission, à $\Omega = \Omega_i$. Cette caractéristique nous l'avons trouvé aussi dans le cas de l'homogénéité pour $S = 0.9$. Nous avons donné les valeurs de Ω_i pour chaque mode et pour chaque cas de S et de J_d/J (sur le tableau suivant).

$S = 0.9, J_d/J = 0.9$										
Mode	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ω_i	3.26	3.28	3.48	3.86	4.36	4.80	5.32	5.90	6.32	6.58
$S = 0.9, J_d/J = 1.0$										
Mode	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ω_i	3.76	3.80	4.00	4.38	4.94	5.50	6.10	6.68	7.14	7.42
$S = 1.0, J_d/J = 0.9$										
Mode	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ω_i	3.26	3.28	3.48	3.86	4.36	4.80	5.34	5.92	6.32	6,50
$S = 1.1, J_d/J = 0.9$										
Mode	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ω_i	3.26	3.28	3.48	3.86	4.36	4.80	5.34	5.92	6.32	6,50

Tableau (3.1a) : Les fréquences correspondant à l'égalité entre le coefficient de transmission et de réflexion dans le cas de cisaillement à 45° dans les films minces composite de type A/B.

Le point correspondant à $\Omega = \Omega_i$ donné, dans le tableau précédent, est la valeur de Ω qui donne $t = r$ et qui correspond au point à partir duquel le coefficient de réflexion devient plus important. Les résultats donnés dans le tableau montrent que Ω_i augmente en passant du mode un (1) au mode dix (10) cela peut s'expliquer par le décalage de l'intervalle de propagation vers les grandes fréquences, en passant du mode 1 vers le mode 10. Nous constatons aussi que les Ω_i pour le cas $J_d/J = 0.9$ sont les mêmes pour les trois cas de S , d'ailleurs nous trouvons que

les courbes ont le même comportement sur tout l'intervalle de propagation. Dans ce cas, les coefficients t et r ne dépendent pas de la valeur du spin.

Dans le cas de durcissement $J_d/J = 1.1$ et pour $S = 1.1$, les résultats obtenus montrent, pour les cinq derniers modes, une réflexion importante à basse fréquence mais qui diminue très vite pour que la transmission devienne importante en passant par un point d'abscisse Ω_i qui correspond à $t = r$, donnée sur le tableau suivant pour chacun des modes.

Dans le cas où $S = 1.1$ et $J_d/J = 1.1$						
Mode	5	6	7	8	9	10
Ω_i	1.70	2.28	2.92	3.58	4.10	4.44

Tableau (3.1b) : Les fréquences correspondant à $t = r$, à basses fréquence, pour $S = 1.1$ et $J_d/J = 1.1$, dans le cas de cisaillement à 45° dans les films minces composite de type A/B.

Les figures montrent une caractéristique importante des spectres qui est la présence de plusieurs fluctuations. Ces dernières augmentent en fonction de S et de J_d/J . Ces fluctuations correspondent à la présence d'états localisés crée par la présence de défaut de cisaillement étudié. Nous trouvons que cette caractéristique est beaucoup plus importante dans les cinq premiers modes par rapport au cinq derniers modes. Le mode dix (10), singulièrement, présente un coefficient de transmission très important, il est très proche de 100 % notamment dans le cas d'adoucissement. Il est, en grande partie, transmis dans sa gamme de propagation, ceci s'explique par le fait qu'il est fortement énergétique, comparé aux autres modes et aussi par l'absence d'interférences entre les modes localisé et les modes de volume dans cet intervalle de fréquence. Par conséquent, il joue un rôle important dans la conductance magnétique. Les spectres des coefficients de transmission et de réflexion, dans le cas du cisaillement à 30° , sont donnés sur les figures (3.5a), (3.6a) et (3.7a), respectivement, pour $S = 0.9, 1.0, 1.1$. Ces figures montrent que c'est les cinq derniers modes qui présentent plus des fluctuations à hautes fréquences par rapport aux cinq premiers, spécifiquement à hautes fréquences où le coefficient de transmission est important, par contre, à basses fréquences, ces modes présentent, un coefficient de réflexion important dont l'intervalle de fréquence augmente en passant du mode cinq au mode dix. En revanche, les cinq premiers modes présentent des coefficients de transmission important à basse fréquence puis diminuent pour atteindre une valeur Ω_i qui correspond à $t = r$, à partir de laquelle le coefficient de transmission devient de plus en plus important vers les grandes fréquences. Ces modes ne sont pas très influencés par la valeur du spin ou par celle de l'intégral d'échange et leurs

comportements sont les mêmes pour tous les cas. Les valeurs Ω_i correspondant à chaque mode et pour chacune des possibilités des valeurs étudiées de spin et de J sont représentées sur le tableau suivant :

$S = 0.9, J_d/J = 0.9$					$S = 0.9, J_d/J = 1.0$					$S = 0.9, J_d/J = 1.1$					
Mode	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
Ω_i	2.92	3.08	3.38	3.74	4.26	2.88	3.04	3.34	3.70	4.28	2.80	2.96	3.28	3.66	4.26
$S = 1.0, J_d/J = 0.9$					$S = 1.0, J_d/J = 1.0$					$S = 1.0, J_d/J = 1.1$					
Mode	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
Ω_i	3.34	3.50	3.86	4.34	4.74	3.20	3.44	3.80	4.28	4.78	3.16	3.40	3.74	4.24	4.78
$S = 1.1, J_d/J = 0.9$					$S = 1.1, J_d/J = 1.0$					$S = 1.1, J_d/J = 1.1$					
Mode	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
Ω_i	3.64	3.74	4.40	4.82		3.66	3.76	4.12	4.84		3.52	3.70	4.06	4.82	

Tableau (3.2a) : Les fréquences correspondant à l'égalité entre le coefficient de transmission et de réflexion dans le cas de cisaillement à 30° dans les films minces composite de type A/B.

Le tableau (3.2a) a montré que les Ω_i augmentent, légèrement, quand J augmente et un peu plus quand S est plus grand. Les modes 6, 7, 8, 9 et 10 présentent de réflexion importante à basses fréquences dont l'intervalle de fréquence augmente du mode 6 au mode 10. A haute fréquence, nous trouvons une transmission importante avec la présence de résonance de type Fabry-Pérot, après un point d'intersection entre les deux coefficients à Ω_i , dont les valeurs sont données, pour tous les cas et pour les cinq autres modes, sur le tableau suivant :

$S = 0.9, J_d/J = 0.9$					$S = 0.9, J_d/J = 1.0$					$S = 0.9, J_d/J = 1.1$					
Mode	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10
Ω_i	2.20	3.22	4.20	6.50		2.20	3.32	4.32	6.54	7.22	2.24	3.28	4.42	6.60	7.22
$S = 1.0, J_d/J = 0.9$					$S = 1.0, J_d/J = 1.0$					$S = 1.0, J_d/J = 1.1$					
Mode	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10
Ω_i	2.50	3.50	4.51	6.14		2.48	3.58	4.60	6.28		2.52	3.56	4.64	6.42	
$S = 1.1, J_d/J = 0.9$					$S = 1.1, J_d/J = 1.0$					$S = 1.1, J_d/J = 1.1$					
Mode	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10
Ω_i	2.68	3.68	4.96	6.58		2.74	3.80	5.10	6.76		2.74	3.78	5.24		

Tableau (3.2b) : Les fréquences correspondant à l'égalité entre le coefficient de transmission et de réflexion dans le cas de cisaillement à 30° dans les films minces composite de type A/B.

Nous pouvons déduire du tableau ci-dessus que la fréquence Ω_i est en fonction du numéro de mode, de J_d/J et de S , à l'exception du mode 9, pour $S = 1.0$, nous trouvons que Ω_i diminue comparativement à celle correspondant à $S = 0.9$.

Nous avons tracé pour les deux défauts de cisaillement étudiés, l'allure des conductances magnétiques $\sigma(\Omega)$, dans les trois possibilités de l'environnement magnétique, en fonction de l'énergie de précession Ω . Nous rappelons que la conductance est définie analytiquement comme étant la contribution de l'ensemble des modes à la transmission d'ondes de spins. Autrement dit, c'est la somme des coefficients de transmission individuel du système se propageant à une fréquence Ω donnée. Physiquement, elle permet de connaître l'aptitude du système à laisser passer les magnons. La conductance présente l'inconvénient de perdre l'information sur l'apport de chaque mode de magnon. Néanmoins, elle est accessible expérimentalement, du moment qu'on peut exciter et détecter les précessions des spins à une fréquence donnée. Nous avons représenté aussi celle du guide d'ondes parfait sur les mêmes figures, afin de noter les diverses modifications induites par l'existence de l'interface de cisaillement dans les films composites. La courbe du guide d'ondes parfait, $\sigma(\Omega)$ présente un aspect sous forme d'escalier, où chaque palier correspond au nombre de modes propageant dans l'intervalle de fréquence considérée. Toutes les informations sont sur le tableau (3.3).

Energie de diffusion normalisée Ω	Nombre de modes	Numéro de mode
$\Omega \in [0.00 - 0.091]$	Un mode	Mode 1
$\Omega \in [0.091 - 0.38]$	Deux modes	Modes 1 et 2
$\Omega \in [0.38 - 0.82]$	Trois modes	Modes 1, 2 et 3
$\Omega \in [0.82 - 1.38]$	Quatre modes	Modes 1, 2, 3 et 4
$\Omega \in [1.38 - 1.991]$	Cinq modes	Modes 1, 2, 3, 4, 5
$\Omega \in [1.991 - 2.61]$	Six modes	Modes 1, 2, 3, 4, 5, 6
$\Omega \in [2.611 - 3.17]$	Sept modes	Modes 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7
$\Omega \in [3.17 - 3.611]$	Huit modes	Modes 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
$\Omega \in [3.611 - 3.901]$	Neuf modes	Mode 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9
$\Omega \in [3.901 - 3.991]$	Dix modes	Mode 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [3.991 - 4.091]$	Neuf modes	Mode 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [4.091 - 4.371]$	Huit modes	Mode 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [4.371 - 4.821]$	Sept modes	Mode 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [4.821 - 5.381]$	Six modes	Mode 5, 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [5.381 - 5.991]$	Cinq modes	Mode 6, 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [5.991 - 6.611]$	Quatre modes	Mode 7, 8, 9, 10
$\Omega \in [6.611 - 7.171]$	Trois modes	Mode 8, 9, 10
$\Omega \in [7.171 - 7.611]$	Deux modes	Mode 9, 10
$\Omega \in [7.611 - 7.901]$	Un seul mode	Mode 10

Tableau (3.3) : Nombre de modes magnonique se propageant dans l'intervalle de propagation des films composites de type A/B à dix plans atomique parallèles.

Sur les figures (3.2b), (3.3b) et (3.4b), nous avons tracé la conductance magnonique correspondant au cisaillement 45° , respectivement, pour $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

Pour pouvoir examiner l'influence de l'intégrale d'échange sur la conductance, nous avons représenté sur la même figure pour chaque cas de spin, les courbes de la conductance pour les trois valeurs de J étudié à savoir $J_d/J = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

Nous notons sur celles-ci une conductance très importante sur tout l'intervalle de Ω .

A très basses fréquences pour $\Omega \in [0.00 - 0.38]$, la conductance est très implorante quelle que soit les valeurs de J_d/J ou de S , elle tend vers 100%. Dans la première moitié de l'intervalle des fréquences, les spectres des conductances présentent des résonances de type Fabry-Pérot leurs hauteurs diminuent quand S et J_d/J augmentent. Par contre, dans la deuxième partie de l'intervalle des fréquences, les résonances diminuent, voir disparaissent dans le cas d'adoucissement et de l'homogénéité des contraintes. Dans cette partie, la conductance dans le cas d'adoucissement reste toujours basse par rapport aux deux autres cas quel que soit la valeur de S . L'amplitude et le nombre de résonances de la conductance dans les cas de l'homogénéité augmentent quand S augmente. Nous notons dans chacune des trois figures un pic à $\Omega = 3.94$. Il correspond au durcissement pour $S = 0.9$, à l'homogénéité pour $S = 1.0$ et à l'adoucissement pour $S = 1.1$.

Les figures (3.5b), (3.6b) et (3.7b), montrent les différentes conductances concernant le défaut de cisaillement 30° . Dans celles-ci, nous ne constatons aucune résonance. Les spectres ont tous la même allure quel que soit S et J_d/J . Les amplitudes sont importantes de $\Omega = 0$ jusqu'à $\Omega = 2.61$, puis, diminuent pour s'annuler à partir de $\Omega = 5.38$.

Sur l'intervalle $[4.82 - 5.38]$, nous remarquons que la conductance concernant l'adoucissement diminue quand S augmente et celle concernant le durcissement augmente.

II.2) Diffusion de magnons dans les films composites en présence de lacunes

Une lacune est un site du réseau qui ne contient aucun atome. Les défauts de type lacunaires sont des défauts ponctuels dans les cristaux créés par l'absence d'un ou plusieurs atomes sur un ou plusieurs sites d'un cristal. Les lacunes sont naturellement présentes dans les cristaux à des concentrations qui sont d'autant plus fortes que la température est proche de la température de fusion du matériau. Elles peuvent être, également, produites par irradiation, Lors d'une collision entre un projectile (électron par exemple) et un atome du matériau, celui-ci peut être éjecté de son site lorsque l'énergie qui lui est communiquée est suffisante. Leur observation peut être obtenue par quelques voies microscopiques [33-36], mais leur

caractérisation pratique ne se fait qu'à travers de ses effets sur les matériaux citons le changement de dimension, la distorsion du réseau cristallin et les modifications des propriétés électriques. La présence de ce type de défaut permet d'expliquer le phénomène de diffusion dans les matériaux. Les lacunes, les amas de lacunes et les cavités augmentent l'énergie interne du cristal et ils peuvent être des puits de potentiel très importants. Pour créer ce type de défaut dans un cristal en pression constante, il faut appliquer une enthalpie libre, appelée l'énergie de Gibbs de forme générale : $G_f = H_f - TS_f$.

Avec H_f est l'enthalpie de formation, elle est indiscernable de l'énergie de formation E_f ou souvent appelée U_f , S_f est l'entropie de formation qui est une propriété liée au défaut ponctuel résultant du désordre introduit dans le cristal, en modifiant les propriétés vibratoires des atomes voisins et T est la température.

II.2.1) Résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires

i) 1^{er} cas : lacunes au centre

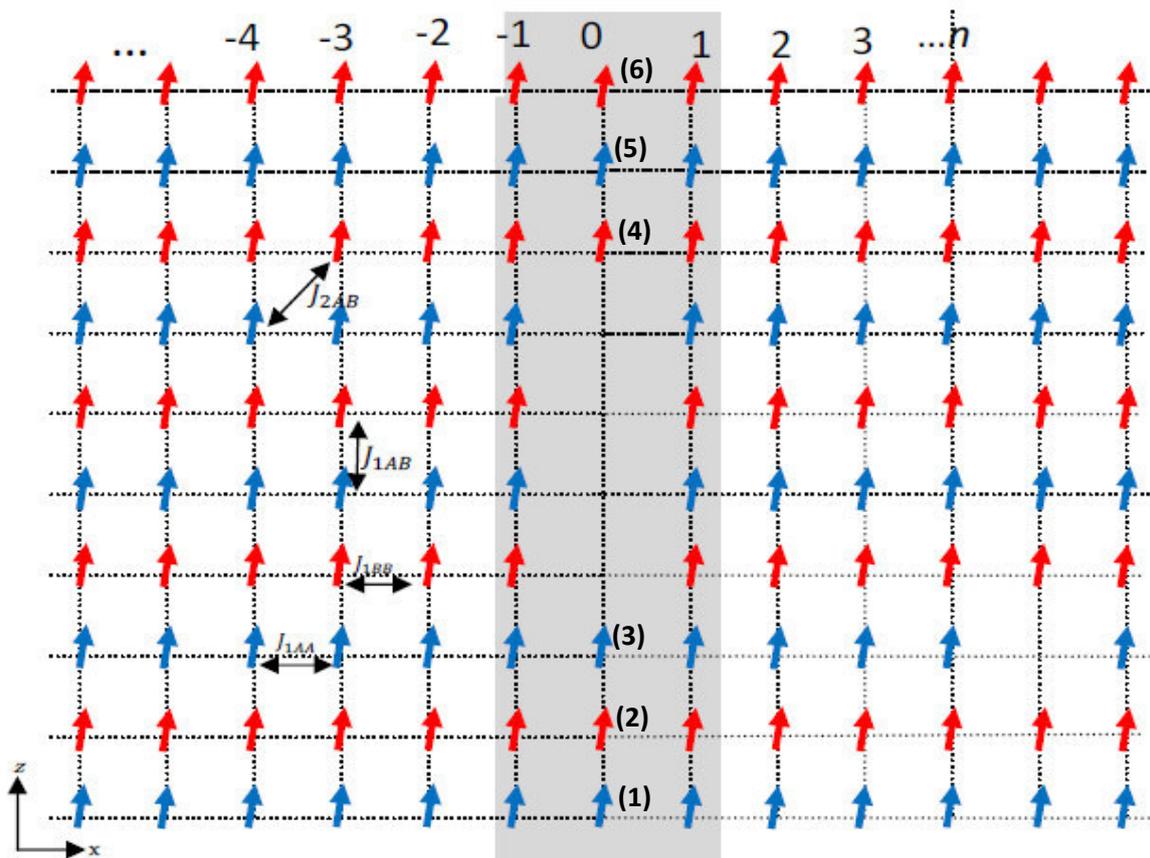


Figure (3.8) : Représentation schématique d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B, en présence d'un défaut lacunaire au milieu, suivant le plan (xOz).

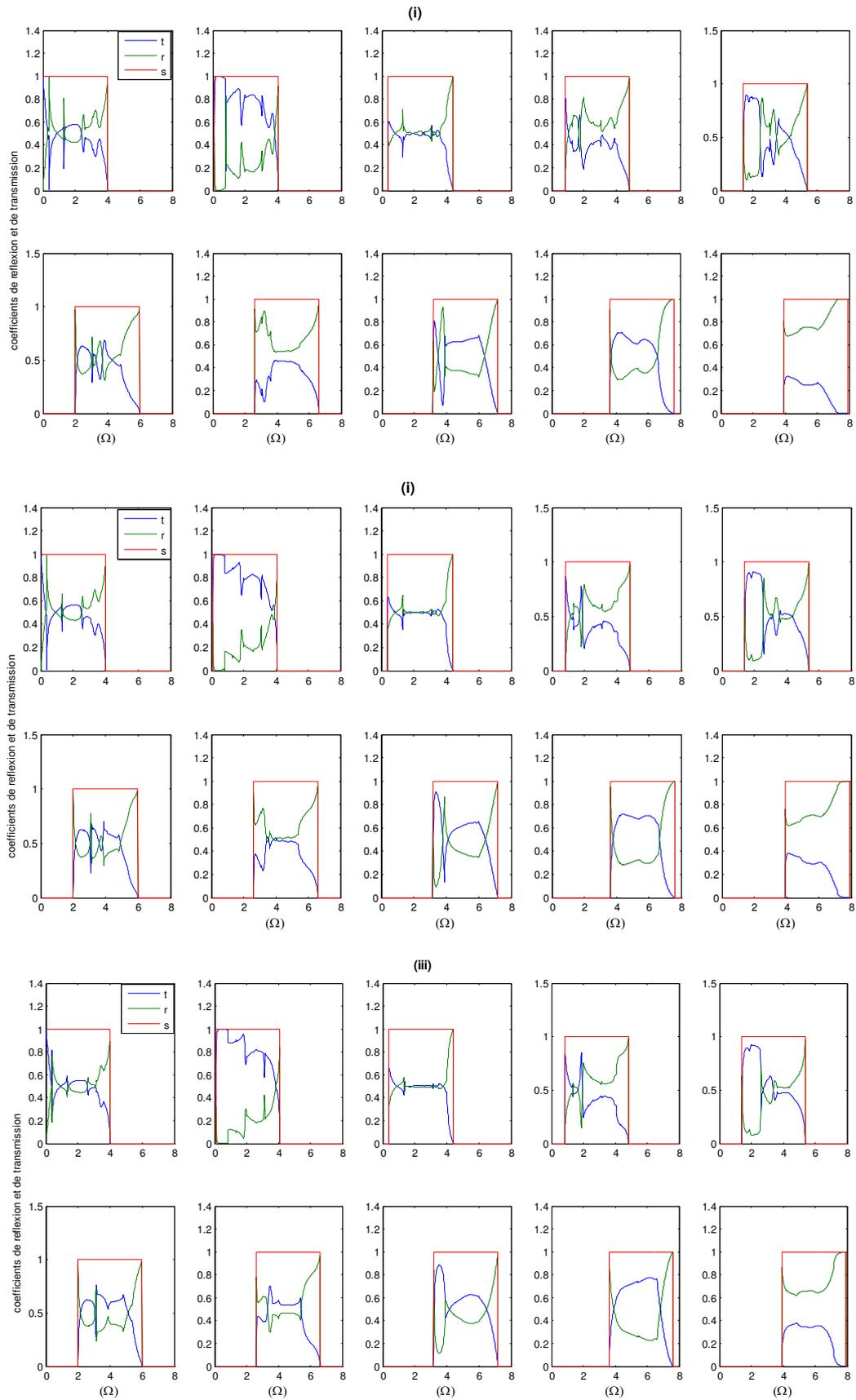


Figure (3.9a) : Coefficient de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 0.9$).

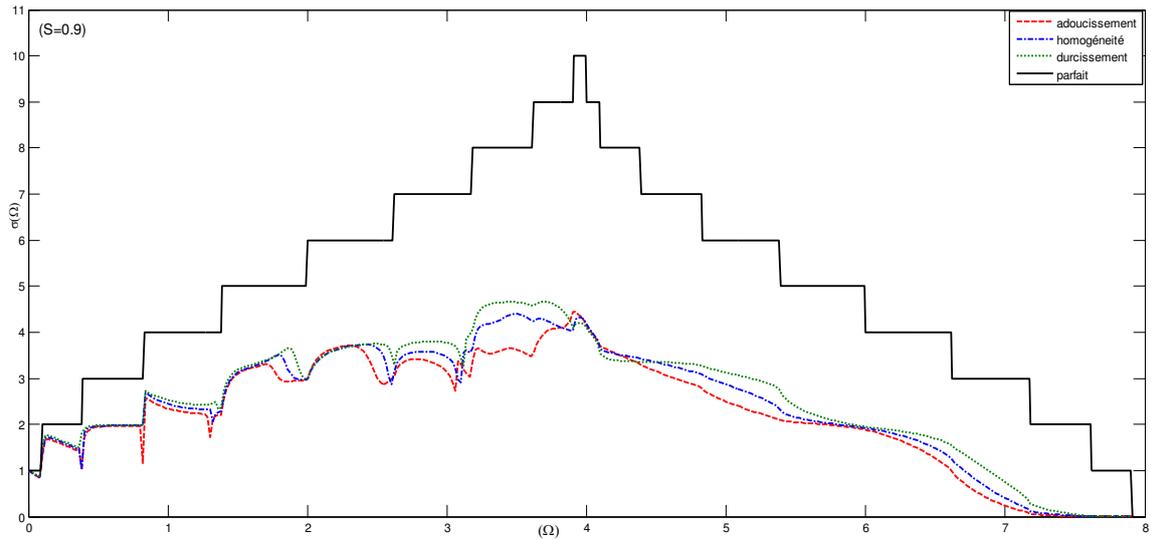
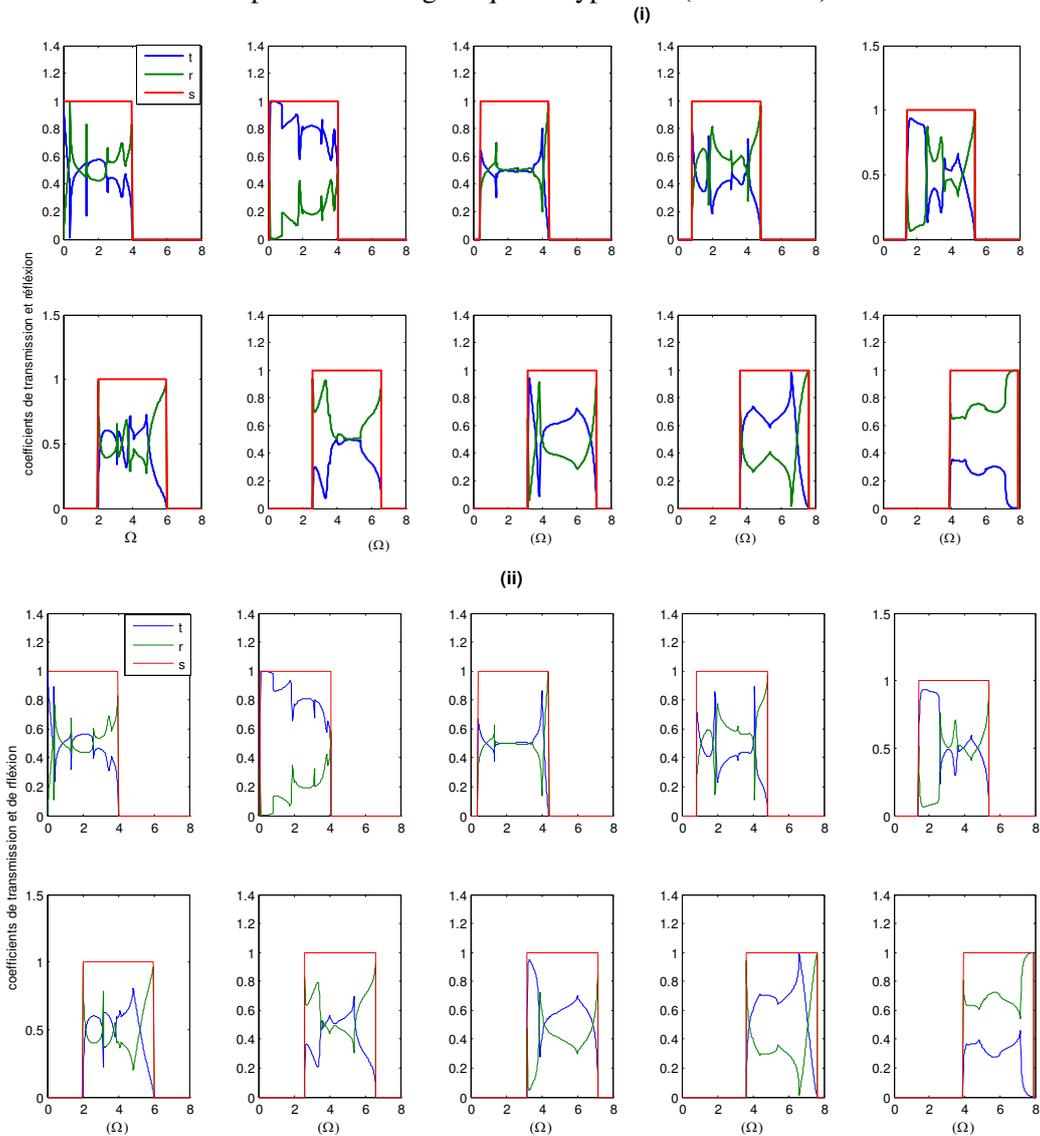


Figure (3.9b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas $S = 0.9$).



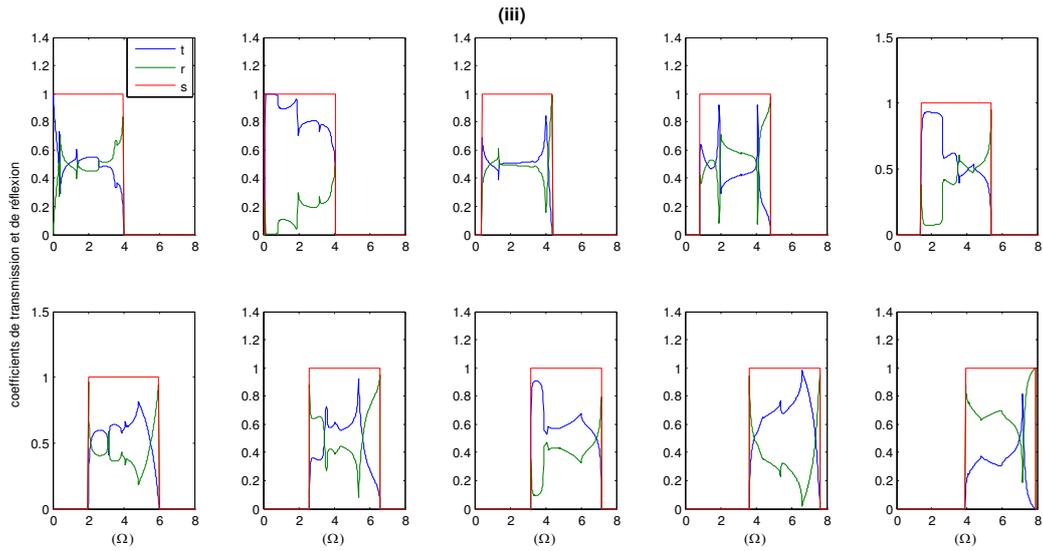


Figure (3.10a) : Coefficient de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 1.0$).

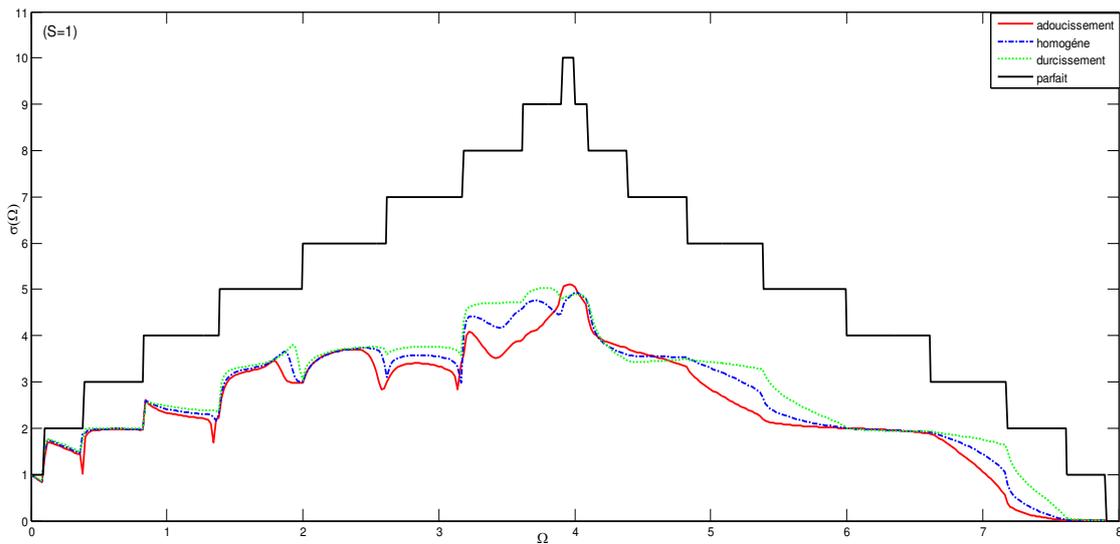


Figure (3.10b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 1.0$).

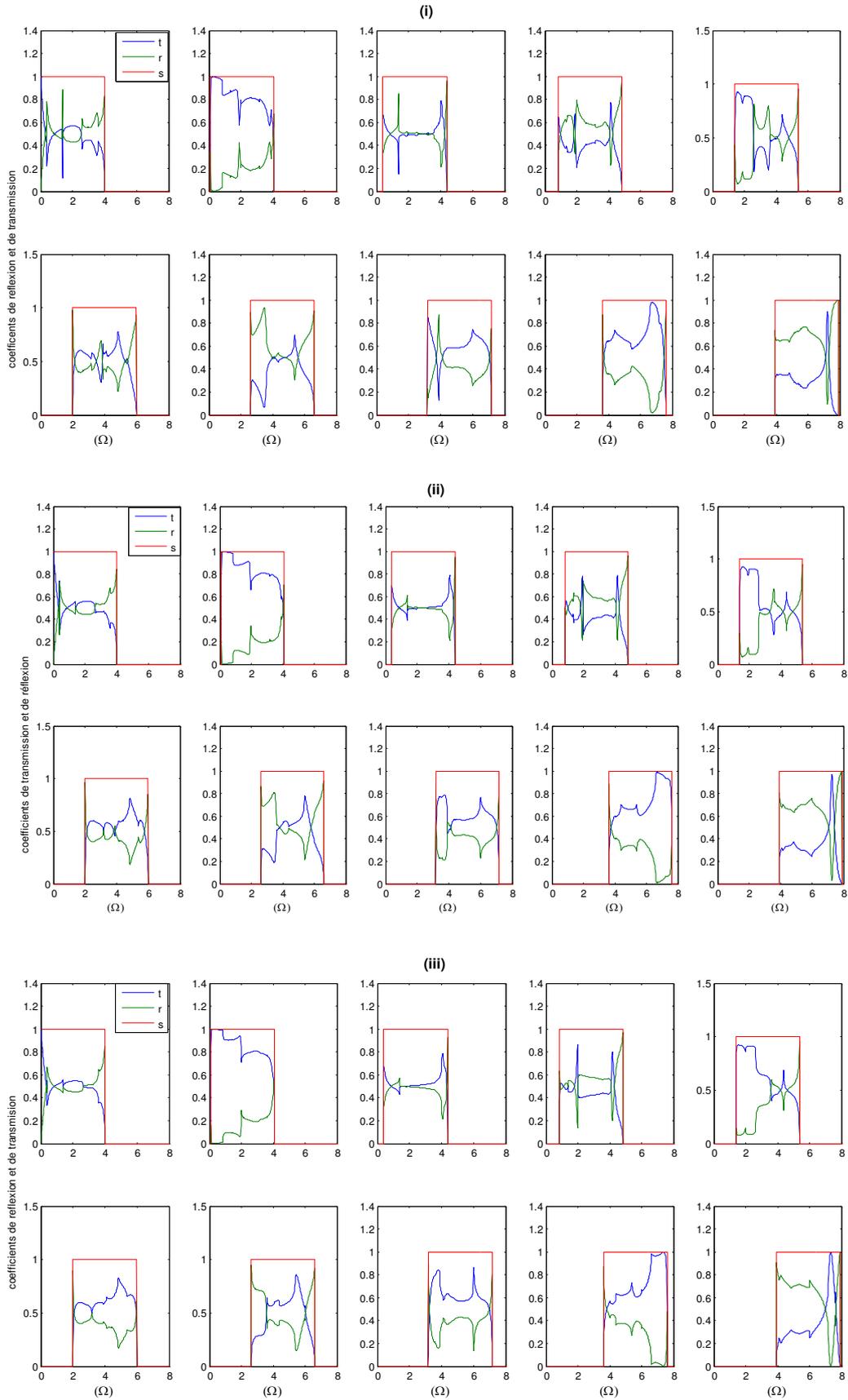


Figure (3.11a) : Coefficient de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas $S = 1.1$).

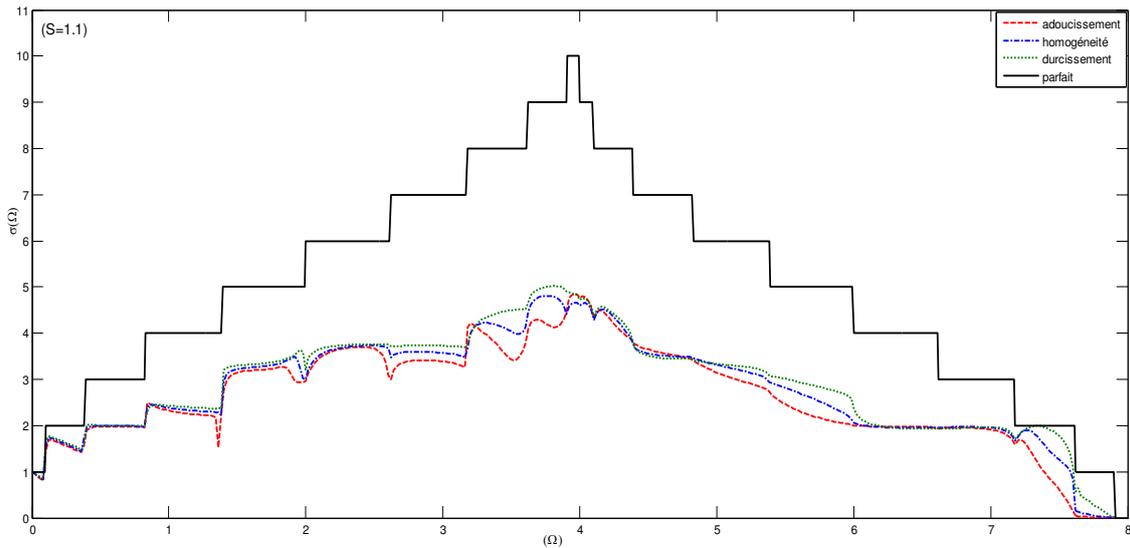


Figure (3.11b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire au milieu d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 1.1$).

ii) 2^{ème} cas : lacunes aux extrémités

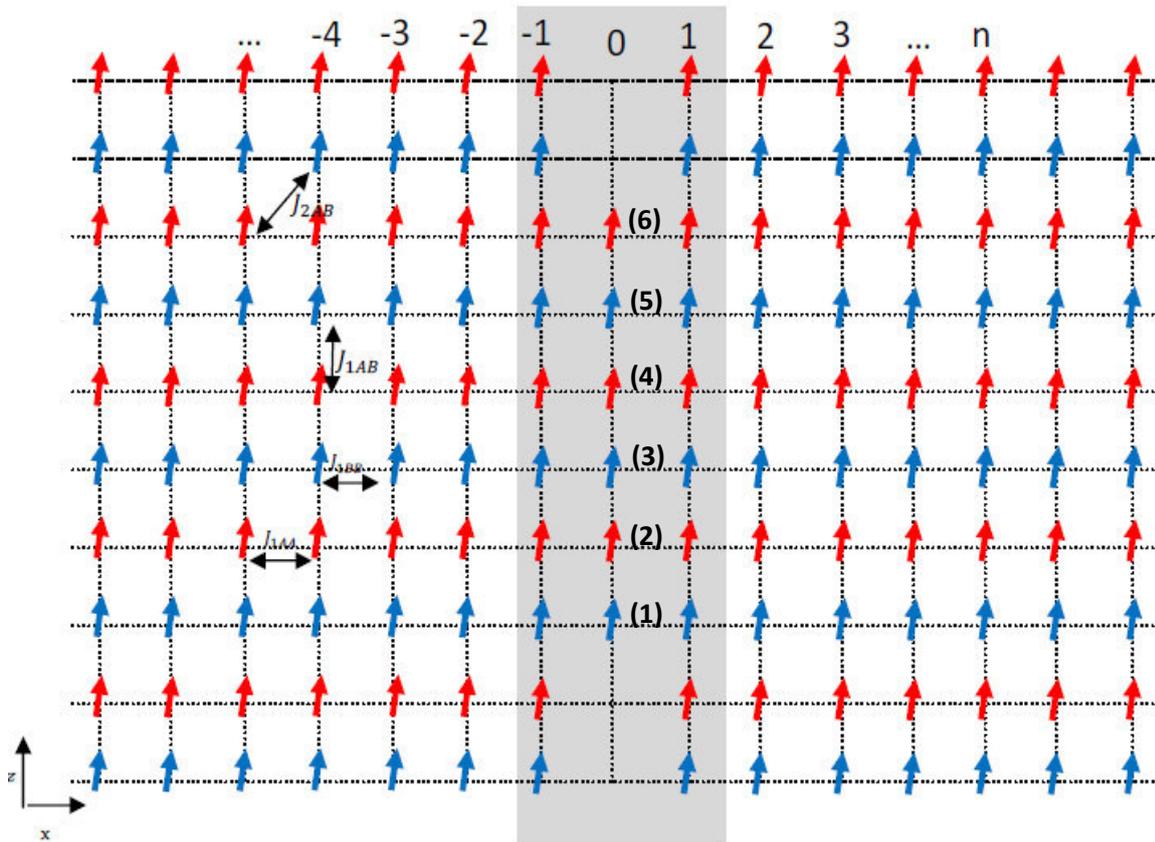


Figure (3.12) : Représentation schématique des films minces ferromagnétiques de type A/B en présence des défauts lacunaires aux extrémités, suivant le plan (xOz) .

Les coefficients de transmission et de réflexion

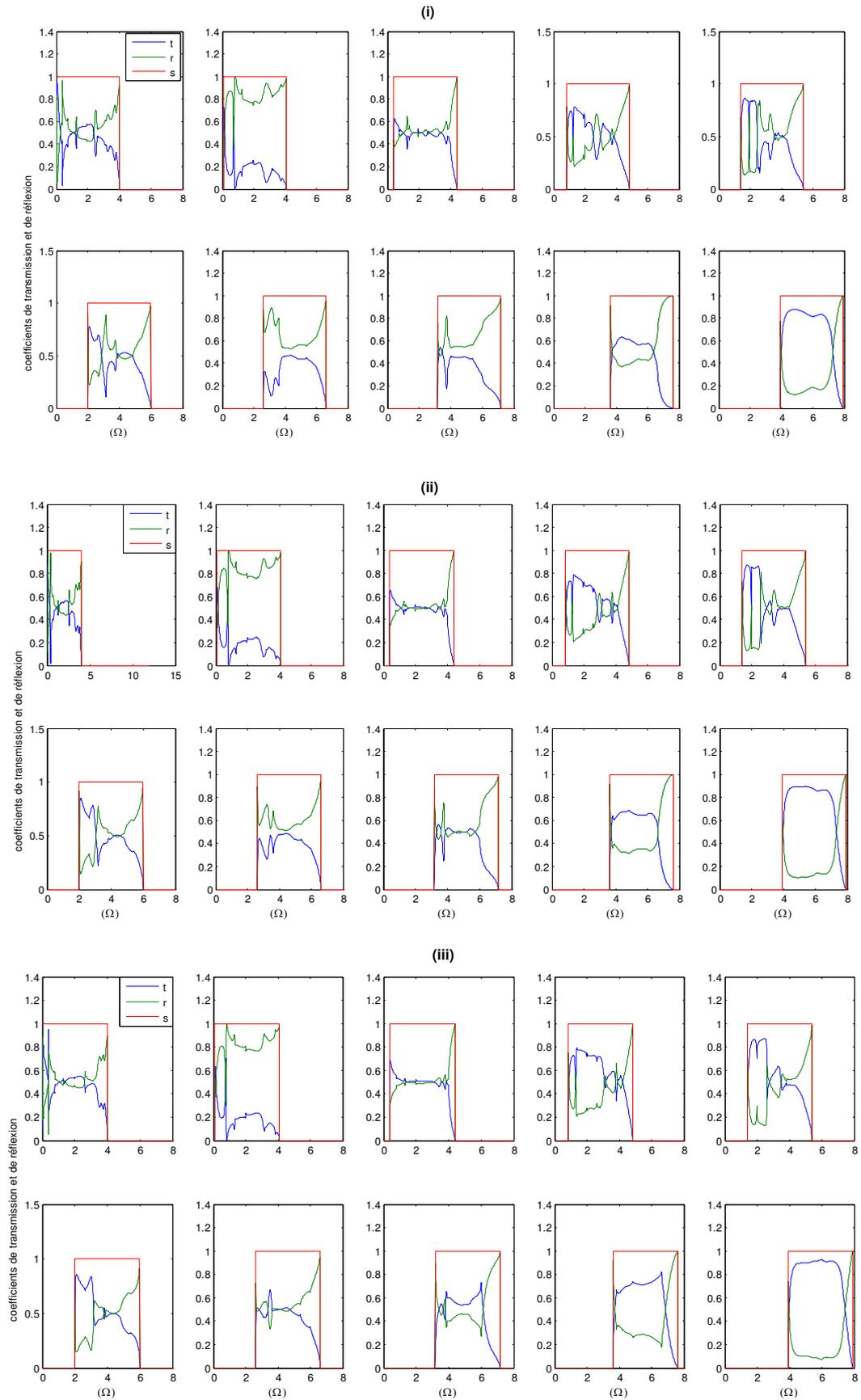


Figure (3.13a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 0.9$).

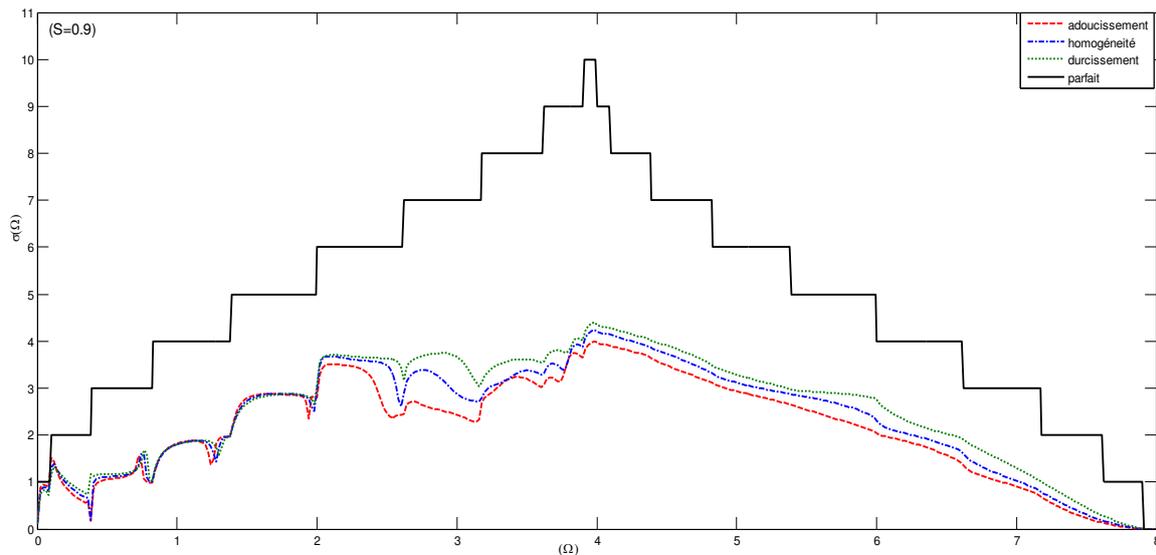
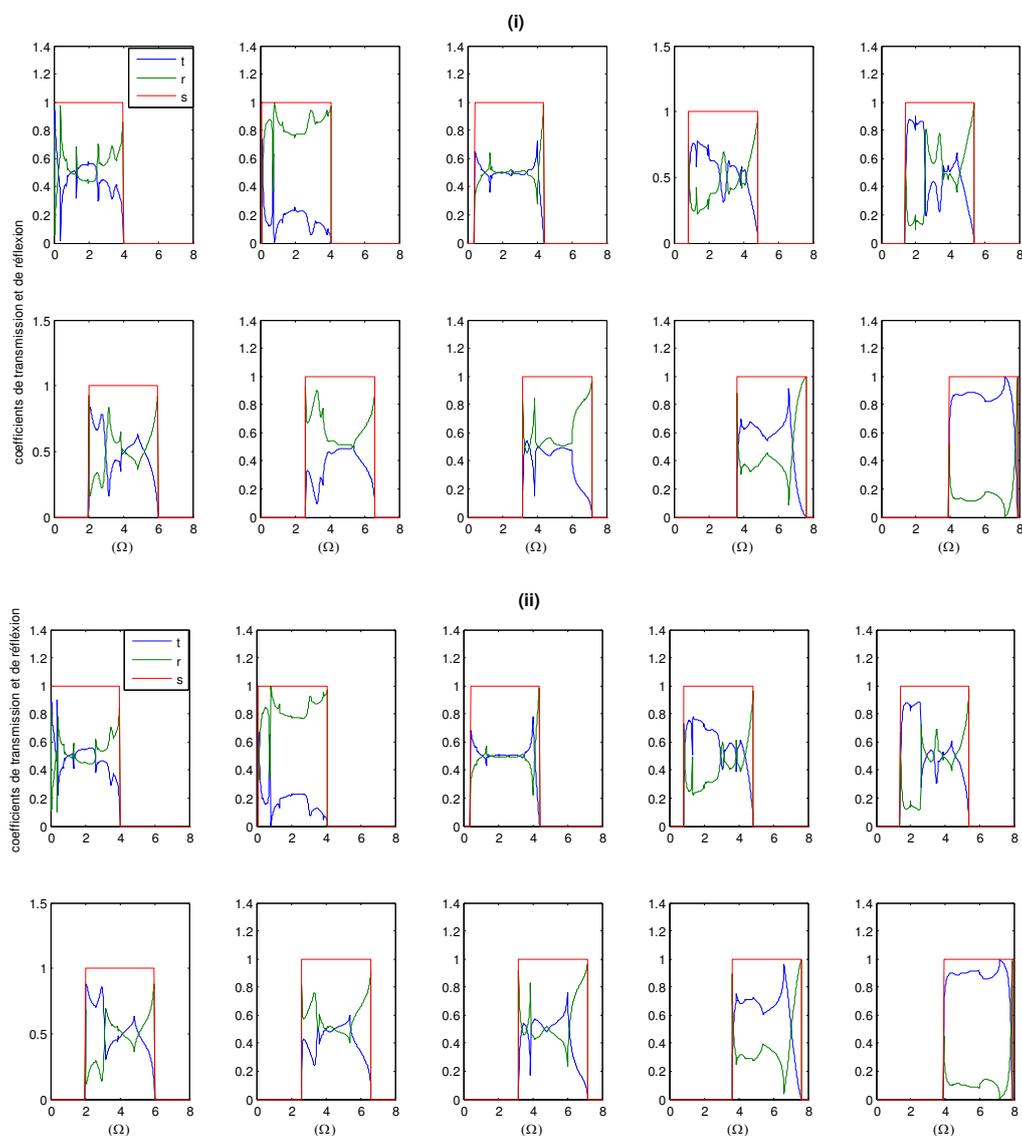


Figure (3.13b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 0.9$).



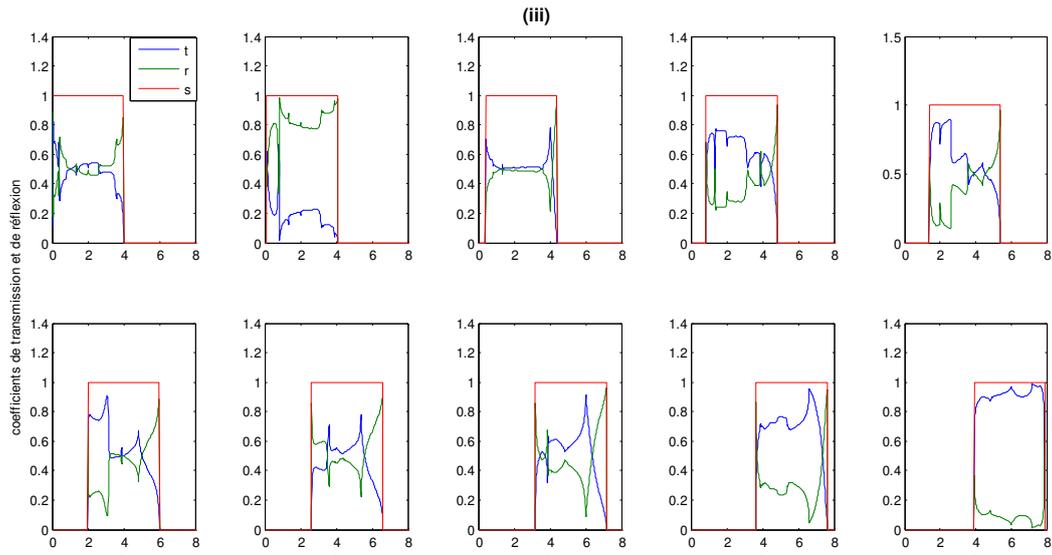


Figure (3.14a) : Coefficient de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 1.0$).

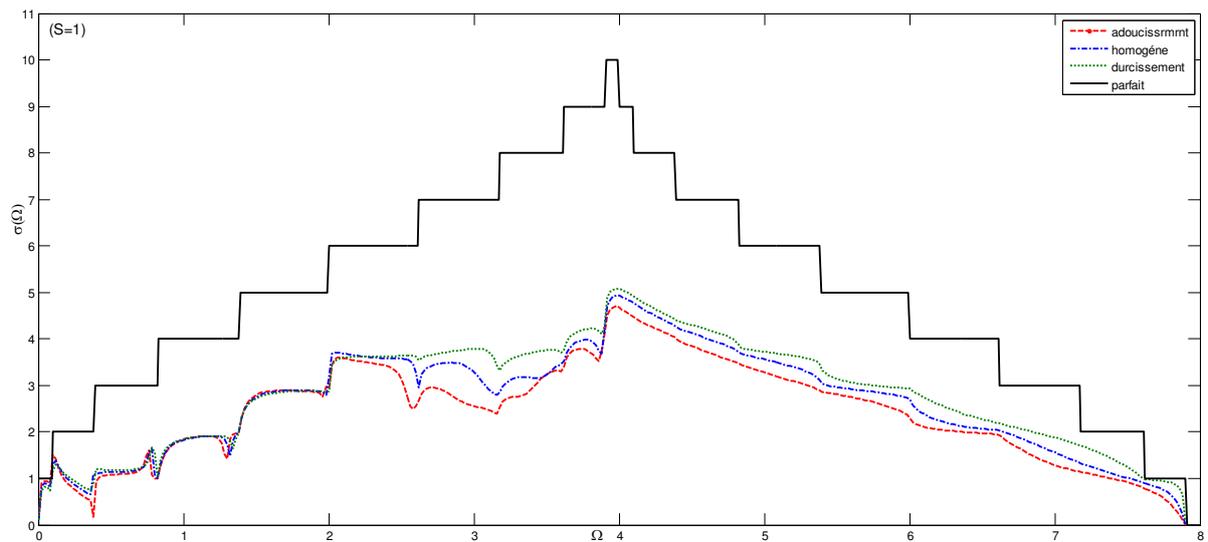


Figure (3.14b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas $S = 1.0$).

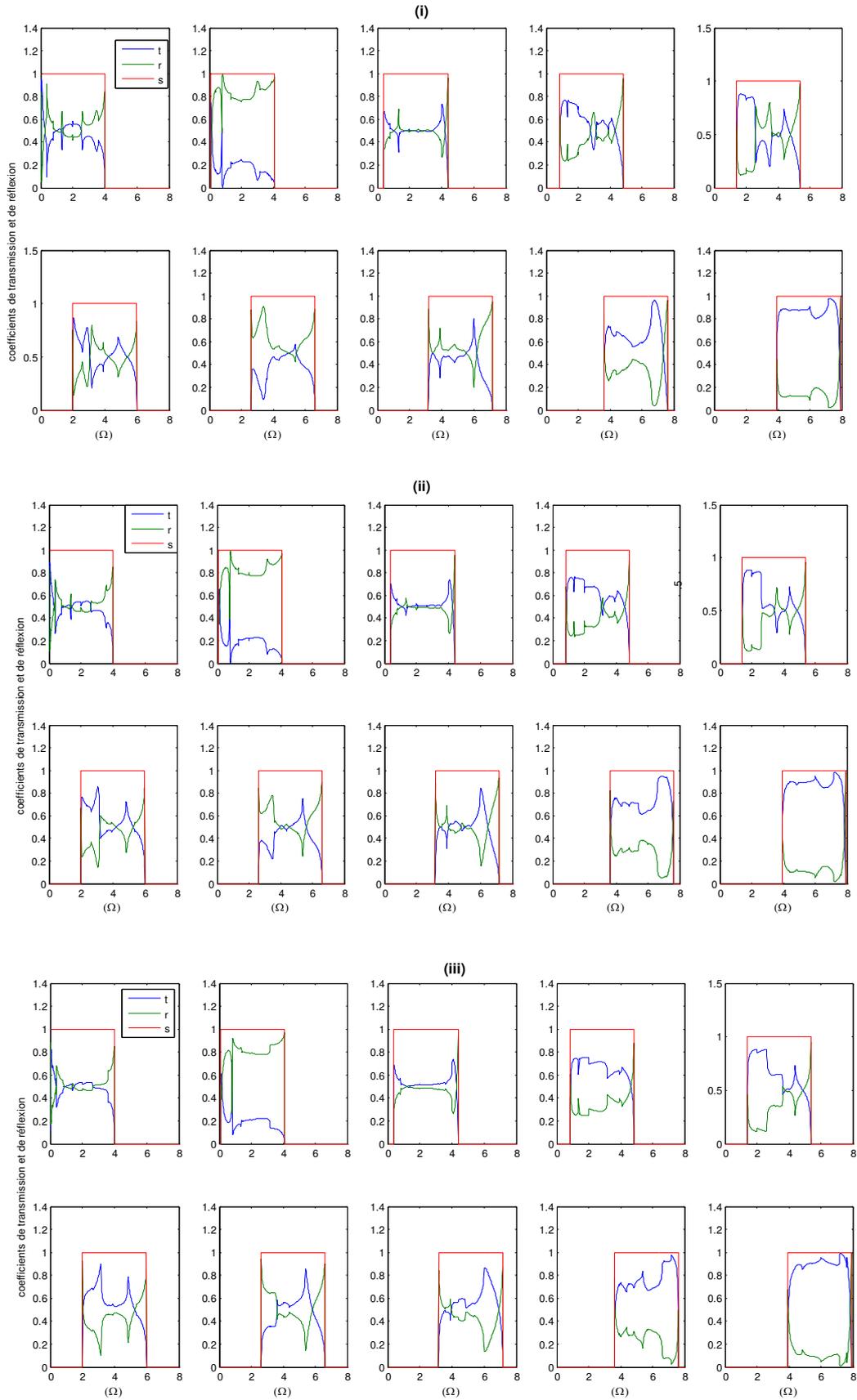


Figure (3.15a) : Coefficients de réflexion et de transmission magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas $S = 1.1$).

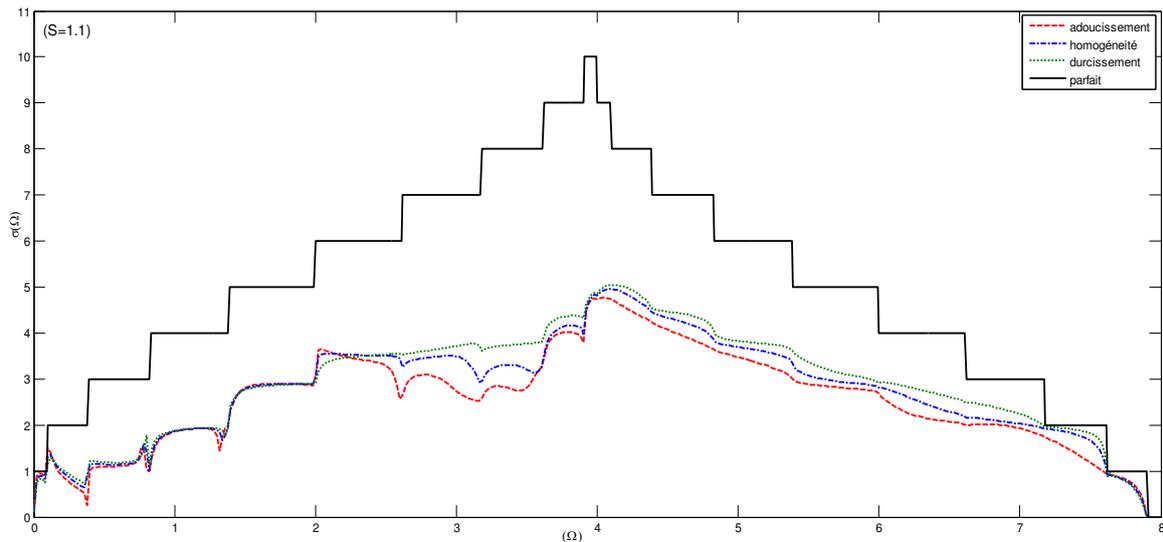


Figure (3.15b) : Conductance magnonique à travers un défaut lacunaire aux extrémités d'un film mince composite ferromagnétique de type A/B (cas où $S = 1.1$).

II.2.2) Interprétation des résultats obtenus dans le cas des défauts lacunaires

Le calcul numérique est effectué pour deux types de film composite, le premier est représenté sur les figures (3.8). Il contient quatre lacunes au centre et un autre est représenté sur la figure (3.12) avec deux lacunes à chacune de ses extrémités.

Pour les deux films, nous avons considéré les mêmes valeurs de spin étudié dans les défauts de cisaillement, à savoir $S = 0.9$, 1.0 et 1.1 , successivement. Ainsi que pour les trois possibilités des d'intégrales d'échange magnétique au voisinage des lacunes, soit $J_d/J = 0.9$, 1.0 et 1.1 , respectivement.

a) Coefficient de transmission et de réflexion des défauts lacunaires

Sur les figures (3.9a), (3.10a) et (3.11a), nous avons représenté les coefficients de transmission et de réflexion, correspondant au défaut lacunaire au centre, respectivement pour $S = 0.9$, 1.0 et 1.1 . Dans chaque cas de S , les dix premières courbes correspondent à $J_d/J = 0.9$, les dix secondes courbes à $J_d/J = 1.0$ et les dix dernières courbes à $J_d/J = 1.1$.

Le mode un présente un pic important à $\Omega = 1.30$ pour $S = 0.9$, à $\Omega = 1.34$ pour $S = 1.0$ et à $\Omega = 1.36$ pour $S = 1.1$. Ce mode présente plusieurs résonances et une réflexion importante.

Le mode deux (2) présente une transmission importante quel que soit J_d/J et quel que soit S et présente plusieurs résonances et leur nombre diminue quand S augmente et l'apparition d'un pic sur le spectre de la réflexion dont la hauteur diminue en fonction de J_d/J et sa position se déplace vers les basses fréquences. Nous avons récapitulé les positions de ces pics sur le tableau suivant

$S = 0.9$				$S = 1.0$				$S = 1.1$			
J_d/J	0.9	1.0	1.1	J_d/J	0.9	1.0	1.1	J_d/J	0.9	1.0	1.1
Ω	1.76	1.90	1.94	Ω	1.88	1.96	1.98	Ω	1.94	1.96	2.00

Le mode trois présente une transmission importante à haute fréquence et proche de la réflexion au milieu et à basse fréquences, c'est la réflexion qui domine. Ce mode présente un pic de réflexion important à $\Omega = 1.30$ pour $S = 0.9$, ce pic se déplace de 0.2 en haute fréquence en fonction de S . Nous le retrouvons à $\Omega = 1.32$ pour $S = 1.0$ et à $\Omega = 1.34$ pour $S = 1.1$. Sa hauteur diminue en allant de l'adoucissement au durcissement.

Le mode quatre présente plusieurs résonances. Leurs hauteurs augmentent en fonction de J_d/J et de S contrairement à leurs largeurs qui diminuent.

Le mode cinq présentent plusieurs résonances dont le nombre diminue en allant de l'adoucissement au durcissement de l'environnement magnétique aux voisinages des lacunes.

Les modes six, huit et neuf présentent des transmissions qui dominent sur presque tous les intervalles de fréquence, avec plusieurs résonances. Leurs nombres augmentent en fonction de J_d/J et de S .

Le dernier mode présente une réflexion plus importante par rapport à la transmission. Ce mode présente, à très hautes fréquences, un pic important de transmission pour $S = 1.0$ et $J_d/J = 1.1$ à $\Omega = 7.34$, pour $S = 1.1$; à $\Omega = 7.52$, pour $J_d/J = 0.9$, et $\Omega = 7.90$, pour $J_d/J = 1.0$ et $\Omega = 7.92$, pour $J_d/J = 1.1$.

Les figures (3.13a), (3.14a) et (3.15a) correspondent aux coefficients de transmission et de réflexion du défaut lacunaire aux extrémités, respectivement, pour $S = 0.9$, 1.0 et 1.1.

Les figures montrent que les modes impairs c.à.d. un, trois, cinq, sept et neuf ont un spectre similaire que celui de défaut lacunaire au milieu.

Par contre, les spectres des modes pairs c.à.d. deux, quatre, six, huit et dix ont un comportement inversent par rapport au précédent. Autrement dit, la réflexion devienne la transmission et vice-versa. Nous pouvons dire que la position des lacunes influence remarquablement sur les modes pairs.

b) Conductances magnoniques des défauts lacunaires

Les Figure (3.9b), Figure (3.10b), Figure (3.11b), donnent les courbes des conductances du défaut lacunaire au milieu du film composite A/B évoqué en figure (3.9), respectivement pour $S = 0.9$, 1.0 et 1.1. Dans la première partie de l'intervalle des fréquences, les courbes présentent des pics pointus vers le bas leurs positions sont données sur le tableau (3.4). Leurs

hauteurs diminuent en allant vers les hautes fréquences. A très basses fréquences la conductance ne varie presque pas en fonction des valeurs d'intégrale d'échange. Néanmoins pour les moyennes et grandes fréquences la conductance diminue en fonction de J_d/J .

A très grandes fréquences la conductance s'annule à l'exception du cas $J_d/J = 1.1$ et $S = 1.1$.

S	J_d/J	Nombre de pics	Ω
0.9	0.9	3	0.82-1.38-3.17
0.9	1.0	1	0.38
1.0	0.9	3	0.38-1.38-3.17
1.1.	0.9	2	1.38-2.61

Tableau (3.4) : Position des pics pointus vers le bas des conductances magnoniques pour un défaut lacunaire au milieu.

Pour le défaut lacunaire aux extrémités les courbes des conductances sont représentées sur la figure (3.13b) pour $S = 0.9$, la figure (3.14b) $S = 1.0$ et la figure (3.15b) pour $S = 1.1$.

Pour ce défaut nous constatons, sur les courbes, que la conductance n'est vraiment pas influencée par la variation de l'intégrale d'échange à très basses fréquences. Dans cette partie d'intervalle de fréquence, nous enregistrons deux petites résonances de Fano, pour toutes les valeurs de J_d/J à $\Omega = 0.09$ et à $\Omega = 0.78$, leurs positions sont données sur le Tableau (3.4).

Par contre, pour les moyennes et les grandes fréquences la conductance diminue quand la constante J_d/J augmente.

III) Conductances (Transmittances) phononiques

Dans cette partie, nous étudions les propriétés vibrationnelles des quatre systèmes considérés dans la partie précédentes, en se basant, toujours, sur la méthode de raccordement.

Explicitement, nous nous intéressons à la diffusion d'ondes élastiques via les interfaces avec angles de cisaillement α ($\alpha = 45^\circ$ et 30° de la figures (3.1)) et du défaut lacunaire (figures (3.8) et (3.12)), décrivant respectivement, un film en présence de lacunes au centre et aux extrémités. L'objectif est d'élucider les mécanismes de transport de phonons et de connaître l'influence des inhomogénéités structurelles sur la dynamique du réseau atomique et les propriétés vibrationnelles.

La multicouche composite sous étude, dans cette thèse, génère un nombre élevé de modes de phonons, et vu que qu'il y a une grande difficulté (voire une impossibilité), de trier les différents modes de vibration, nous avons opté pour la représentation uniquement des spectres

des transmittances phononiques. Notre démarche se justifie par le fait que la conductance n'a pas besoin de connaître l'origine de l'énergie, puisque tous les modes sont excités simultanément. Dans les quatre configurations géométriques, les propriétés vibrationnelles sont fortement dépendantes de plusieurs paramètres. Nous examinons deux types d'influences :

i) Impact des masses atomiques : le film composite est constitué de deux monocouches A et B, par conséquent, chaque site atomique possède une masse m_A ou m_B .

Dans les calculs numériques, nous introduisons le rapport de masses $m = m_B / m_A$. Nous simulons les trois possibilités de masses, à savoir :

- Masse légère ($m_B < m_A$), décrit par $m < 1$.
- Masses comparables ($m_B \approx m_A$), décrit par $m = 1$.
- Masse lourde ($m_B > m_A$), décrit par $m > 1$.

ii) Effet des constantes de force au niveau des zones perturbées : pour chaque type de masse, nous considérons aussi un type de contrainte dans la zone perturbée par rapport à la partie parfaite du film composite. Il ne peut y avoir que trois possibilités d'interactions :

- Adoucissement des contraintes ($k_d < k_{parfait}$).
- Homogénéité des contraintes ($k_d \approx k_{parfait}$).
- Durcissement des contraintes ($k_d > k_{parfait}$).

III.1) Résultats des spectres de conductance

III.1.1) Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 45°

Les résultats obtenus des conductances phononiques calculées, dans le cas de cisaillement sont donnés sur la figure (3.16a) pour l'adoucissement des contraintes, et sur la figure (3.16b) pour l'homogénéité du couplage, et sur la figure (3.16c) pour le cas de durcissement.

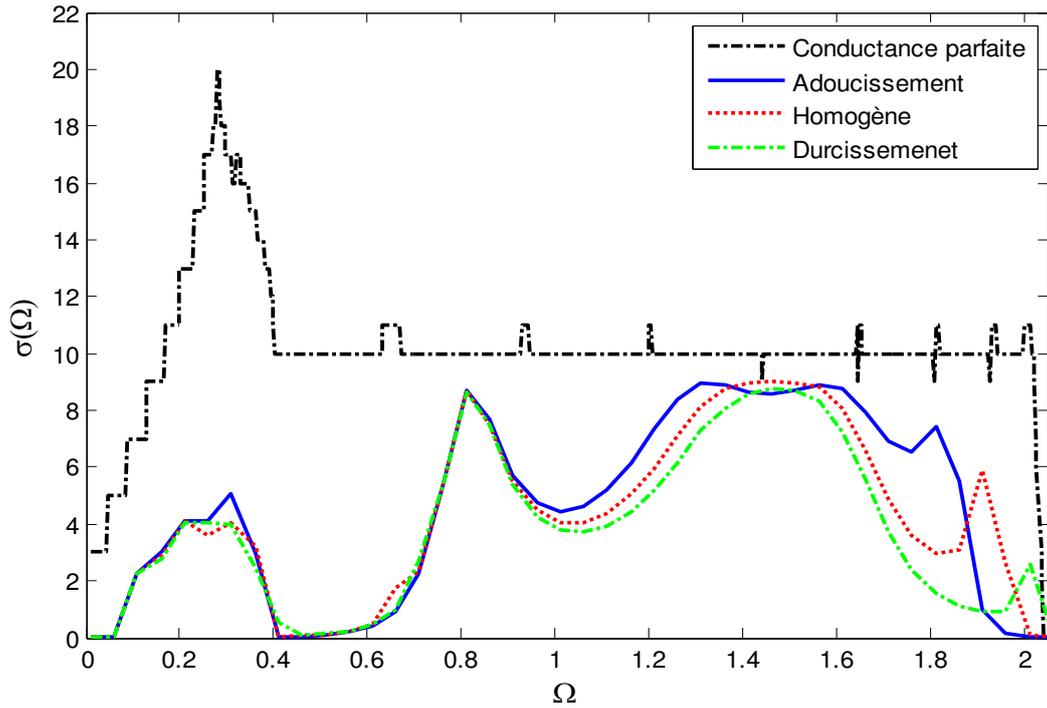


Figure (3.16a) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 45° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse légère ($m < 1$).

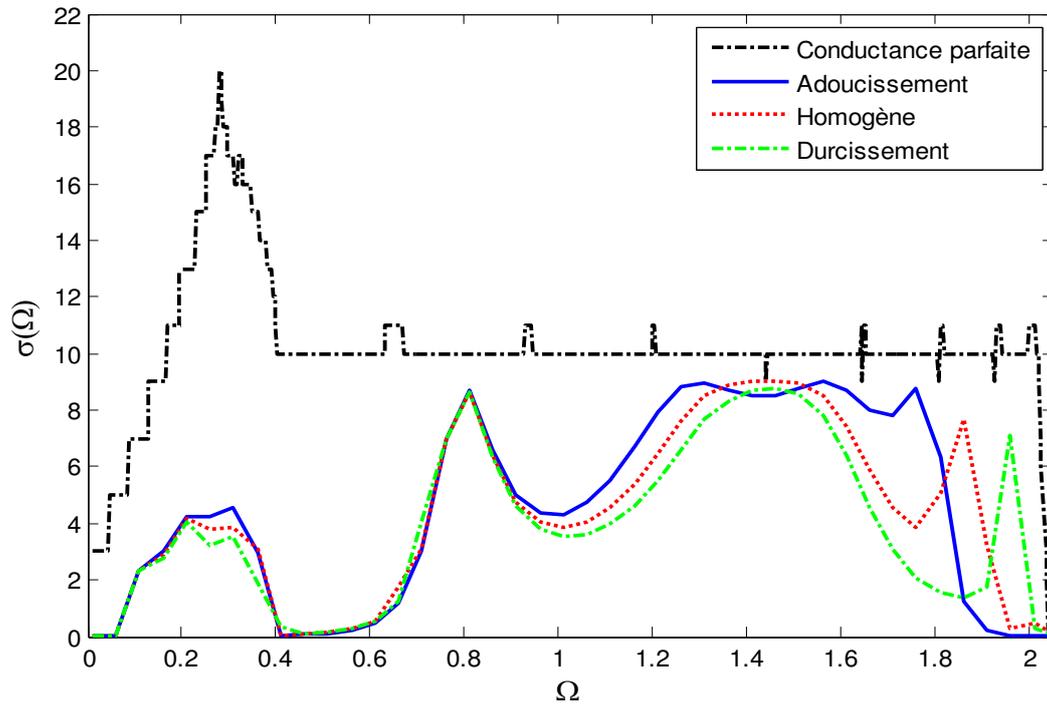


Figure (3.16b) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 45° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas de masses comparables ($m = 1$).

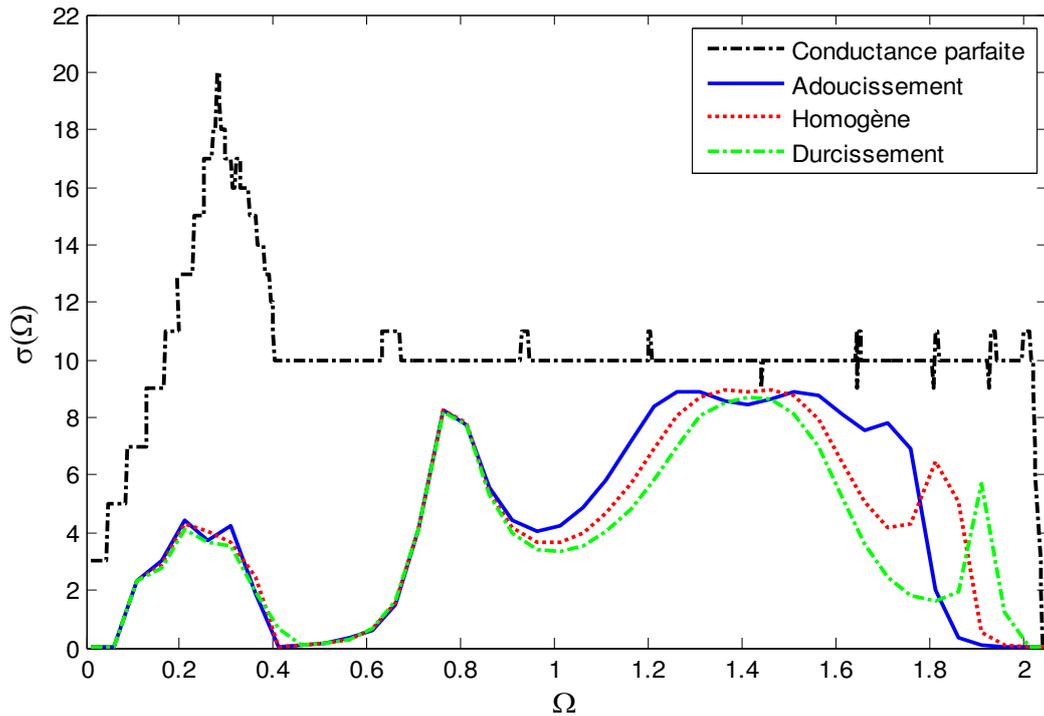


Figure (3.16c) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 45° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse lourde ($m > 1$).

III.1.2) Résultats obtenus dans le cas d'un angle de cisaillement à 30°

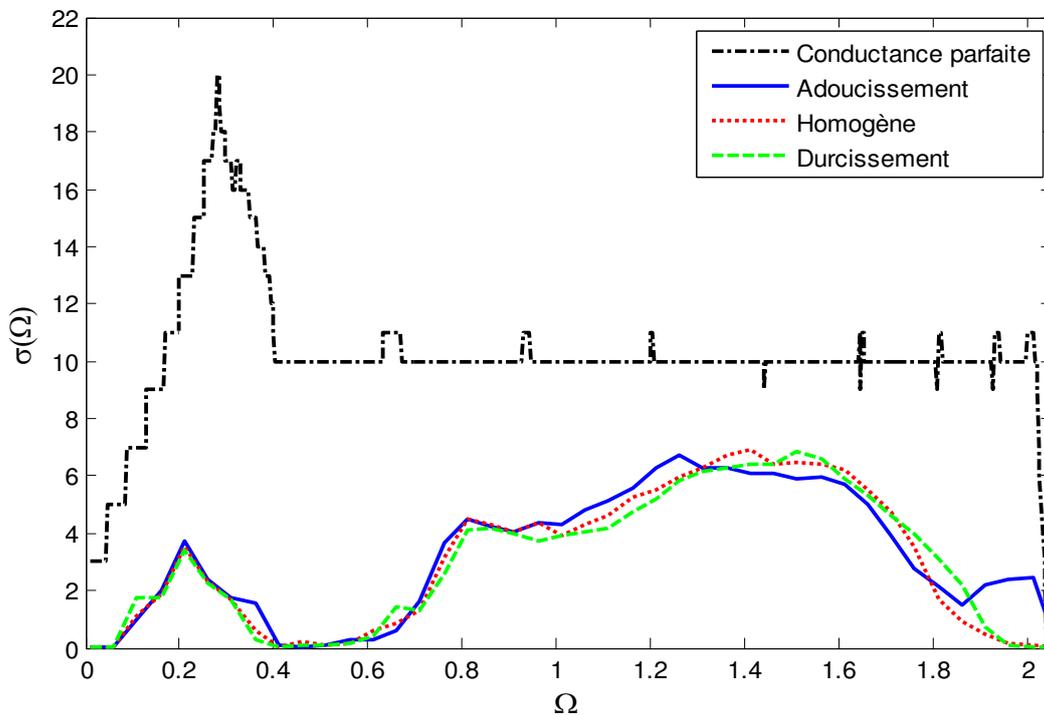


Figure (3.17a) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 30° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse légère ($m < 1$).

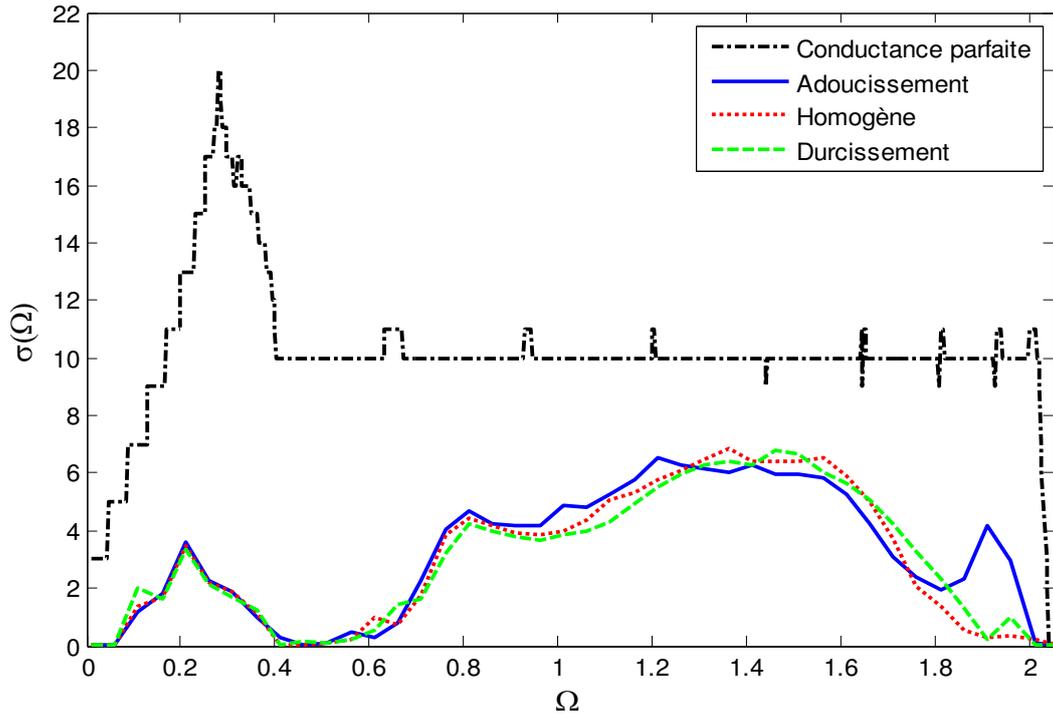


Figure (3.17b) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 30° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas de masses comparables ($m = 1$).

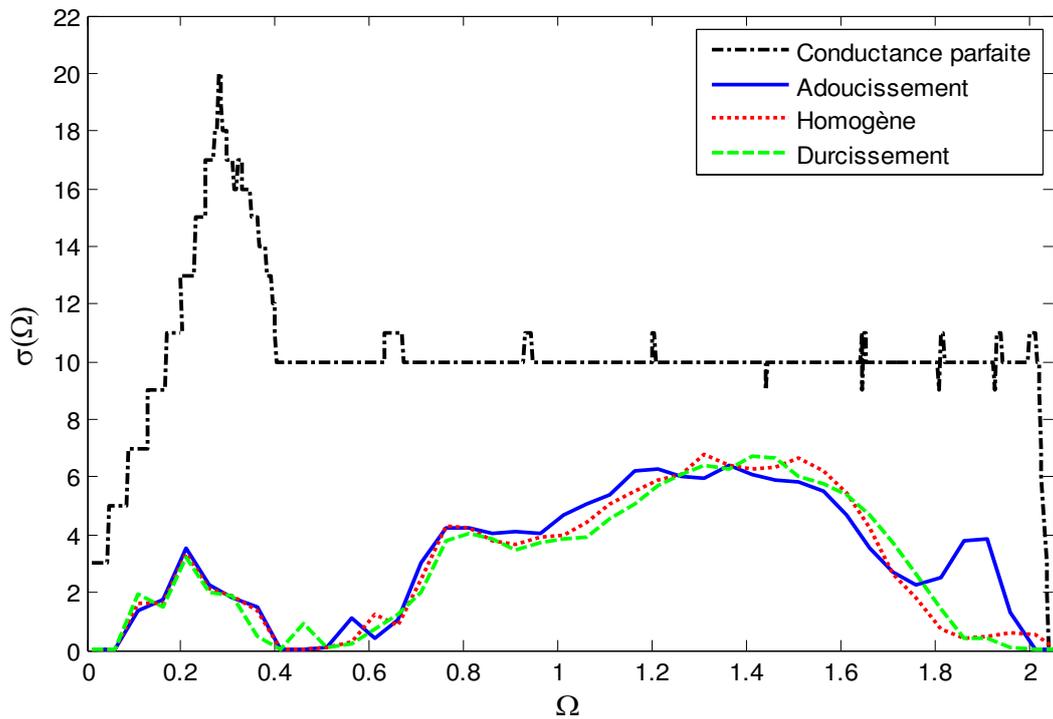


Figure (3.17c) : Conductance phononique à travers un cisaillement à 45° dans un film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse lourde ($m > 1$).

III.1.3) Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes au centre du film

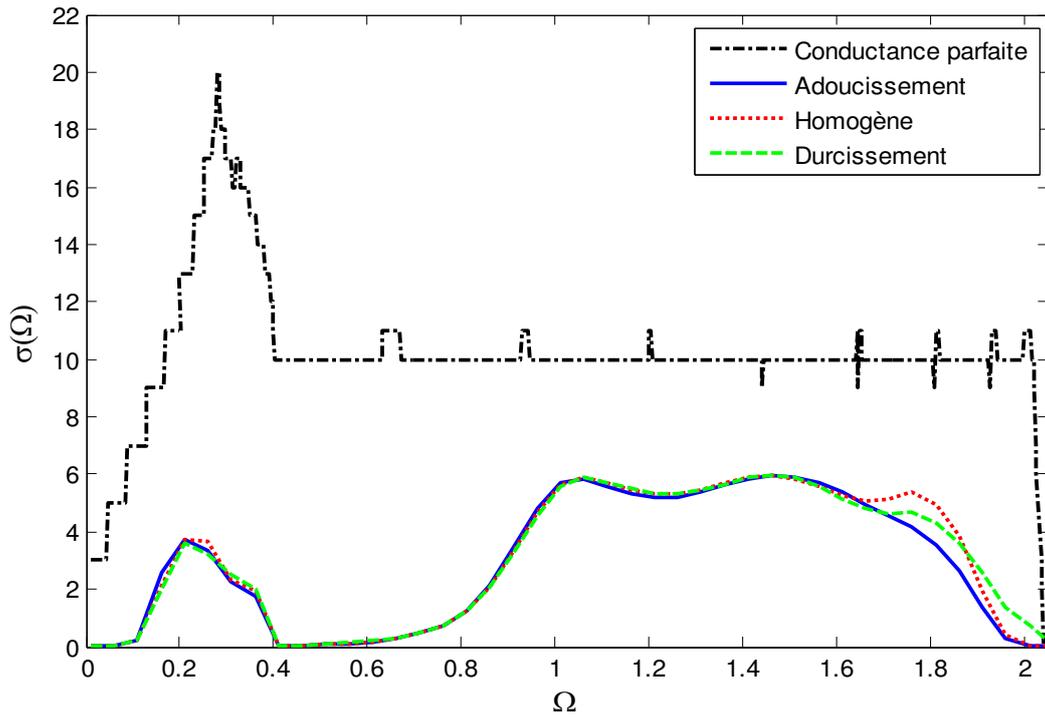


Figure (3.18a) : Conductance phononique en présence de lacunes au centre du film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse légère ($m < 1$).

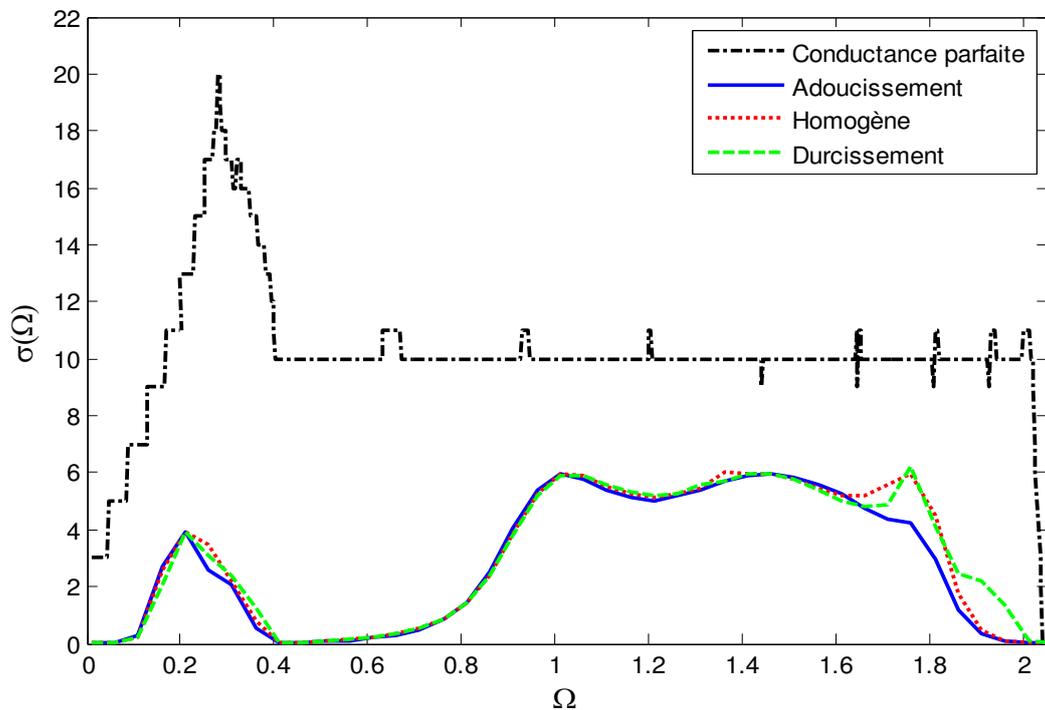


Figure (3.18b) : Conductance phononique en présence de lacunes au centre du film mince composite de type A/B, dans le cas de masses comparables ($m = 1$).

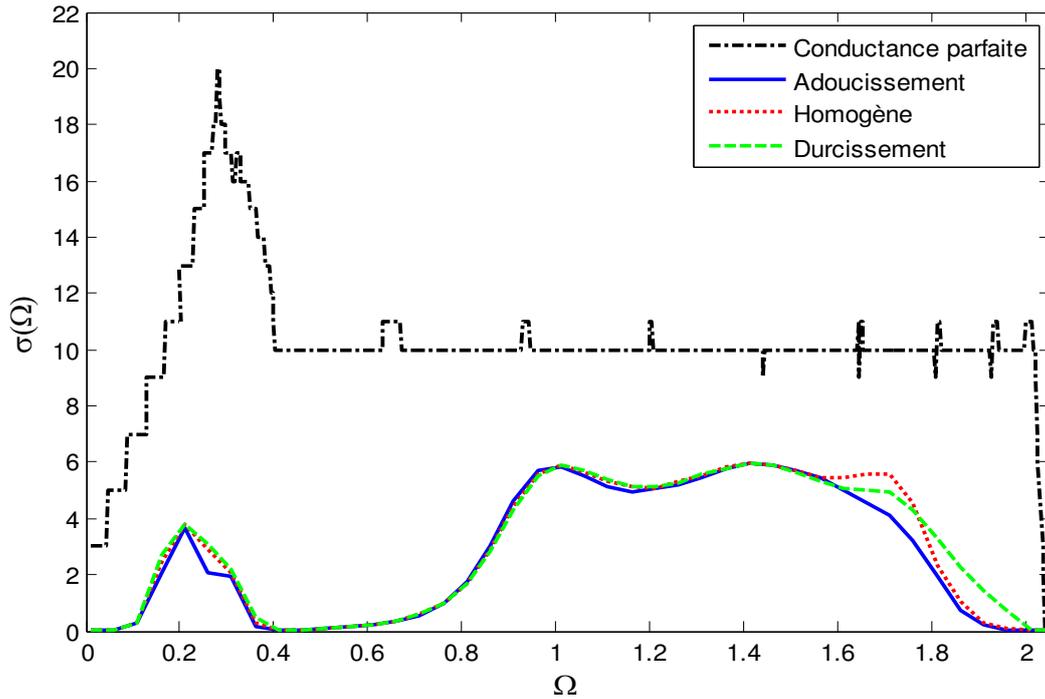


Figure (3.18c) : Conductance phononique en présence de lacunes au centre du film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse lourde ($m > 1$).

III.1.4) Résultats obtenus dans le cas de la présence de lacunes aux extrémités du film

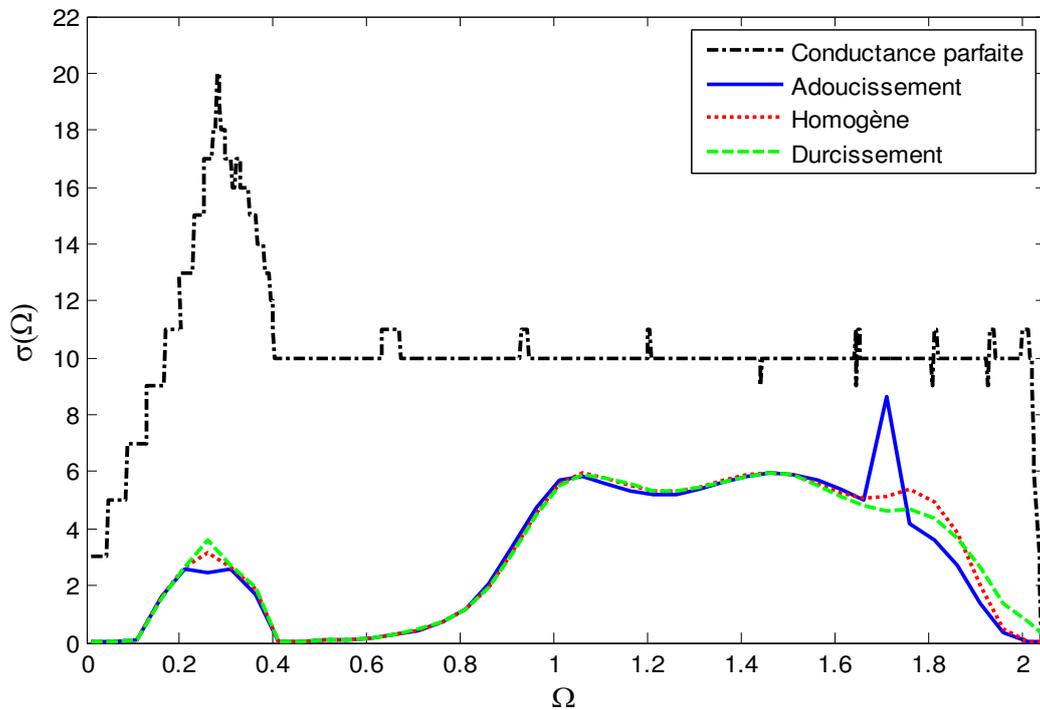


Figure (3.19a) : Conductance phononique en présence de lacunes aux extrémités du film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse légère ($m < 1$).

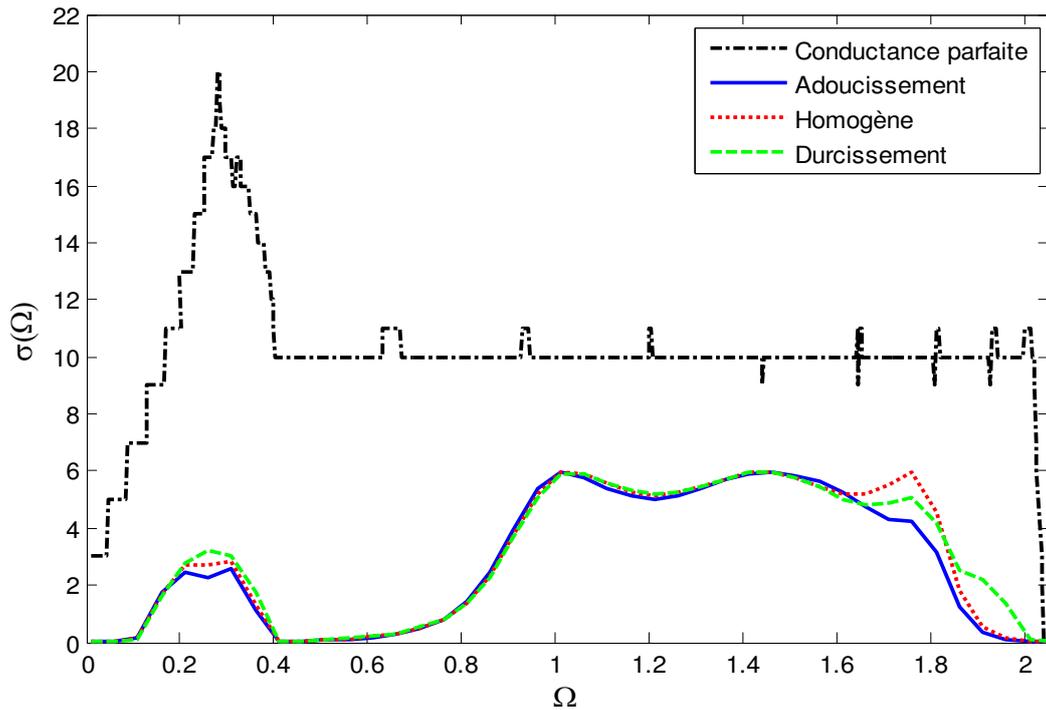


Figure (3.19b) : Conductance phononique en présence de lacunes aux extrémités du film mince composite de type A/B, dans le cas de masses comparables ($m = 1$).

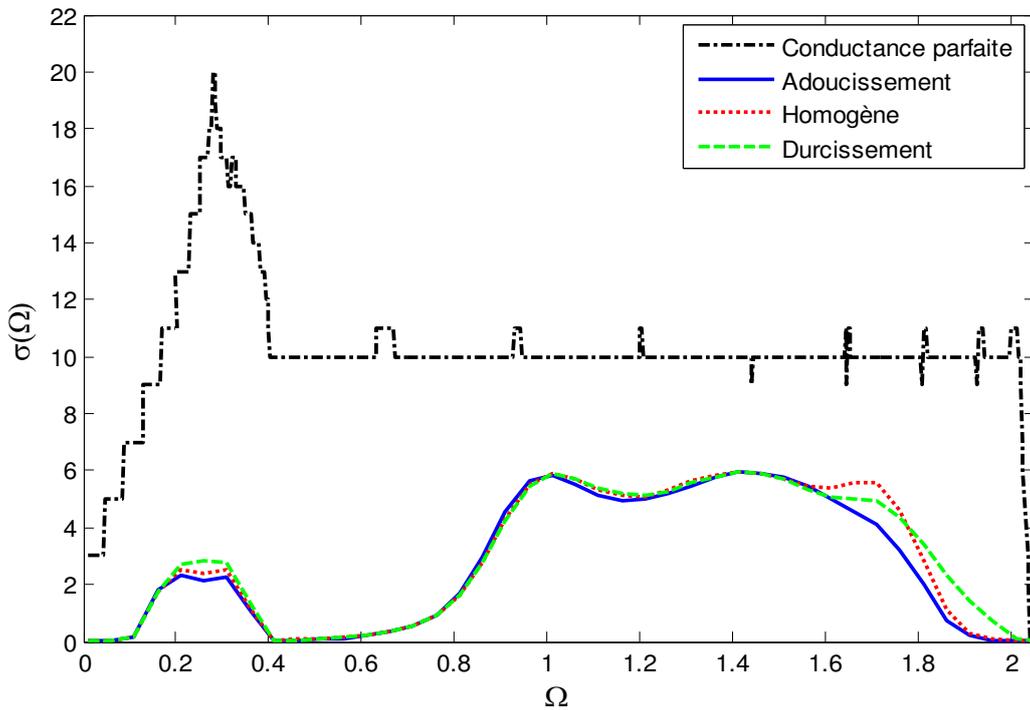


Figure (3.19c) : Conductance phononique en présence de lacunes aux extrémités du film mince composite de type A/B, dans le cas d'un défaut de masse lourde ($m > 1$).

III.2) Interprétation des résultats obtenus pour les conductances phononiques

a) Défauts de cisaillement

Les figures (3.16) et (3.17) montrent les spectres de transmittances phononiques, respectivement, via les zones de cisaillement atomiques pour les angles 45° et 30° .

La plupart des constatations de la partie dédiée à la magnonique restent valables aussi dans le domaine de la phononique.

Nous remarquons qu'à basses fréquences, pour $\Omega \in [0.00, 0.60]$, la conductance est très faible. Au-delà de $\Omega = 0.6$, elle augmente et présente des fluctuations et des pics différents. Certains d'entre eux sont identifiés comme étant des résonances de Fano.

A haute fréquence, la conductance est fortement sensible aux constantes de force. Nous notons des hauteurs différentes en changeant d'angle de cisaillement.

Nous rappelons que les résonances de Fano sont dues aux interactions entre le continuum (états du film composite parfait) et les états résonants autour de la zone cisailée. Leur nombre et leur présence dépendent de l'existence de modes de vibration localisés de même symétrie. L'étude des déplacements des atomes, de la zone formant l'interface décalée entre les deux sous-multicouches, aux fréquences de résonances permettrait de caractériser chacun de ces modes, ou au moins d'identifier leurs comportements principaux.

Nous avons représenté aussi la conductance du guide d'ondes parfait sur la même courbe pour faire une comparaison et noter directement les différentes modifications induites par l'introduction des inhomogénéités structurelles.

Pour le film composite parfait, $\sigma(\Omega)$ est un entier et donne le nombre de modes propageants à la fréquence considérée. Ici, nous retrouvons l'information contenue dans les spectres de dispersion du film (excitation de vingt modes non nuls au maximum). Dans chaque partie de l'intervalle, nous pouvons exciter un nombre fini de modes de vibration.

En présence des défauts, l'écart entre $\sigma(\Omega)$ parfait et sa valeur effective dans le cas d'un défaut donné, constitue une mesure de la réflexion causée par la diffusion élastique sur le domaine propre du défaut.

La hauteur des spectres de conductance est sensible aux variations de la masse m_B . L'intensité diminue avec l'augmentation de la masse.

b) défauts lacunaires

Sur les figures (3.18) et (3.17) sont représentées les courbes de la conductance phononique, respectivement, pour le défaut lacunaire au milieu et le défaut lacunaire aux extrémités. Ces

courbes présentent des conductances très faibles à basses fréquences, dont la plus importante correspond au cas d'adoucissement des contraintes élastiques dans la zone de défaut lacunaire. Certaines remarques faites aux défauts de cisaillement restent valable aussi à la présence des lacunes.

La comparaison entre les deux courbes, des figures (3.8) et (3.12), nous permet de dire que la disposition des lacunes influence fortement les conductances à basses fréquences.

Les courbes de la conductance phononique présentent des oscillations complexes. Elles sont dues aux multiples réflexions sur les bords de la zone des lacunes.

Les résultats prouvent que la conductance de différentes configurations étudiées est une fonction dépendante de l'énergie de diffusion et de la forme géométrique des films composites. Aux plus basses fréquences, les conductances commencent par des valeurs très faibles, puis, elles remontent légèrement et repassent par des valeurs faibles, et au fur et à mesure que Ω augmente, elles présentent des fluctuations et deviennent nulles à la limite de la zone de Brillouin.

IV. Conclusion

Nous avons présenté un modèle de calcul des propriétés de transport cohérent de magnons et de phonons via des défauts de cisaillement et lacunaires. Nous avons considéré deux cas pour chaque défaut. Leurs présences dans les matériaux provoquent de brisure de symétries dans les films composites étudiés. L'objectif est de relever l'influence de ces deux types de défauts sur la transmission des ondes de spins et des ondes élastiques. Nous avons montré que la présence des défauts dans les films ferromagnétiques composite laisse un effet remarquable sur le comportement des ondes.

La conductance et les coefficients de transmission dépendent fortement du type de défaut, de la nature du maillage et de la valeur de l'intégral d'échange et des constantes de force. L'analyse des spectres des conductances a montré que cette dernière est plus importante dans le cas de cisaillement à 45° et présente plus grand nombre de résonances par rapport aux celles des autre défauts et cela est dues à l'interaction du continuum avec les états discrets induits par le défaut, dans le cas des magnons. Par contre, le cisaillement à 30° donne une très faible conductance sans présence de résonances. L'environnement magnétique au voisinage des lacunes influence peu la conductance magnétique à basses fréquences. Elle présente plus de résonances au milieu de l'intervalle de fréquences.

La dernière partie a permis de mettre en évidence le rôle important de ces quatre défauts, sur le transport de phonon, dans le cadre de l'approximation harmonique. Cela a permis de

relever l'influence des différentes formes de défauts et leurs impacts sur les propriétés vibrationnelles. Les conductances phononiques sont plus importantes dans le cas des défauts de cisaillement et la présence d'une résonance de Fano à haute fréquence, pour le cas de durcissement des constantes de force. Cependant, les défauts lacunaires présentent une résonance de Fano dans le cas d'adoucissement des contraintes de forces que nous observons au milieu de l'intervalle de fréquences.

Références du chapitre 3

- [1] S.Y. Liu and Y.C. Shin, *Mater Des* 164, 107552 (2019).
- [2] G. Kasperovich, J. Hausmann, *J. Mater. Process. Technol.* 220, p. 202 (2015).
- [3] S.S. Al-Bermani, M.L. Blackmore, W. Zhang and I. Todd, *Metall. Mater. Trans. A* 41, 3422(2010).
- [4] J. Günther, D. Krewerth, T. Lippmann, S. Leuders, T. Tröster, A. Weidner, H. Biermann and T. Niendorf, *Int. J. Fatigue* 94, 236 (2017).
- [5] R. Streubel, P. Fischer, F. Kronast, V.P. Kravchuk, D.D. Sheka, Y. Gaididei, O.G. Schmidt and D. Makarov, *J. Phys.D: Appl. Phys.* 49, 363001 (2016).
- [6] I. Ozerov, A. Bulgakov, D.Nelson, R. Castell and W.Marine, *Appl. Surf. Sci.* 247, 1-7 (2005).
- [7] J. Appenzeller, J. Knoch, M. Radosavljevic and Ph. Avouris, *Phys. Rev. Lett.* 92, 226802 (2004).
- [8] M.Schirra, R.Schneider, A.Reiser, G. M.Prinz, M.Feneberg, J.Biskupek, U. Kaiser, C.E. Krill, K.Thonke and R.Sauer, *Phys. Rev. B* 77, 125215 (2008).
- [9] A. Couvert, M. Jeppesen, T. Kawalec, G. Reinaudi, R. Mathevet and D. Guery-Odelin, *EPL* 85, 19901 (2009).
- [10] J. Kistner, X. Chen, Y. Weng, H.P. Strunk, M.B. Schubert and J.H. Werner, *J. Appl. Phys.* 110, 023520 (2011).
- [11] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jap.* 77, 014707(2008).
- [12] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, *Physica E* 43, 1213 (2011).
- [13] Y. Gu and Y. Chen, *Phys. Rev. B*, 76 (2007).
- [14] B.Bourahla and O.Nafa, *Spin* 6, 1650007 (2016).
- [15] A. Belayadi, B. Bourahla, A. Mougari and F. Mekideche-Chafa, *Int. J. Model. Simul. Scient. Comput* 11, 2050046 (2020).
- [16] R. Soulairol, C.C. Fu and C. Barreteau, *Revue de Métallurgie* 108, 27 (2011).
- [17] M. Büttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* 49, 1739 (1982).
- [18] R. Landauer, *J. Phys.: Condensed Matter* 1, 8099 (1989).
- [19] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet and A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, 1707 (1997).
- [20] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, *Phys. Rev. B* 31, 6207 (1985).
- [21] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1761 (1986).
- [22] M. Büttiker, H.Thomas and A. Prêtre, *Phys. Lett. A* 180, 364 (1993).
- [23] Y. Pennec and A. Khater, *Surf. Sc.* 348, 82 (1996).

- [24] B. Bourahla, A. Khater and R. Tigrine, *Thin Solid Films* 517, 6857 (2009).
- [25] O. Nafa, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri (2014).
- [26] J.J. Versluijs, M.A. Bari and J.M.D. Coey, *Phys. Rev. Lett.* 87, 026601 (2001).
- [27] R. Anufriev and M. Nomura, *Phys. Rev. B* 91, 245417 (2015).
- [28] J.C. Duda, T.E. Beechem, J.L. Smoyer, P. M. Norris and P. E. Hopkins, *J. Appl. Phys.* 108, 073515 (2010).
- [29] M. Collet, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud - France (2017).
- [30] D. Ghader, Thèse de Doctorat, Université du Maine, Le Mans - France (2013)
- [31] D. Royer and E. Dieulesaint, *Ondes élastiques dans les solides*, MassonEds.(1996).
- [32] L. Rayleigh, *London Math. Soc. s1-17*, 4-11 (1885).
- [33] J. Lemaitre, J.L. Chaboche, A. Benallal and R. Desmorat, *Mécanique des matériaux solides*. Dunod Eds., Paris (2009).
- [34] S.J.L. Billinge, P. Ercius and J. Miao, *Atomic electron tomography: 3D structures without crystals*, *Science*, vol. 353 (2016).
- [35] C. Speicher, *Phys. Lett.* 23, 196 (1966).
- [36] M.P. Moody, P.A.J. Bagot, G.D.W. Smith and B. Gault, *Micro.Microanal.* 23, 268 (2017).

CHAPITRE

4

Densités d'états phononiques & magnoniques locales dans une multicouche composite présentant des défauts de type cisaillement et lacunes

Sommaire

I. Introduction
II. Densités spectrales et densités d'états – Rappels
II.1. Formalisme théorique décrivant les densités phononiques et magnoniques
a) Les éléments de la matrice des fonctions de Green
b) Calcul des éléments de l'opérateur de Green G
c) Densités spectrales
d) Densités d'états
III) Résultats des spectres LDOS des sites irréductibles dans une multicouche composite
III.1) Résultats relatifs aux spectres des densités d'états magnoniques
III.1.1) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 45°
III.1.2) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 30°
III.1.3) LDOS en présence des lacunes au centre du film
III.1.4) LDOS en présence de lacunes aux extrémités
III.2) Résultats des spectres relatifs aux densités d'états phononiques
III.2.1) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 45°
III.2.2) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 30°
III.2.3) LDOS phononiques en présence de lacunes au centre du film
III.2.4) LDOS phononiques en présence de lacunes aux extrémités
IV) Interprétation et discussion des résultats LDOS obtenus
IV.1) Cas des magnons
IV.2) Cas des phonons
IV) Conclusion
Références du chapitre 4

I) Introduction

La structure cristalline d'un matériau permet à certaines ondes de se propager dans une direction, tout en supprimant leurs propagations dans une autre. En effet, l'espacement interatomique et la charge atomique d'un matériau ne laisse exister que des électrons de certaines longueurs d'ondes, souvent, seuls certains états sont autorisés. Ainsi, il peut arriver que de nombreux états soient disponibles pour une occupation à un niveau d'énergie spécifique, alors qu'aucun état n'est disponible à d'autres niveaux d'énergie. La densité d'état (en anglais Local Density of States - LDOS) est définie d'une manière que la quantité $D(\omega)d\omega$ soit le nombre d'états d'énergies compris entre ω et $(\omega+d\omega)$.

Elle est d'une grande importance puisqu'elle est mesurable expérimentalement et d'après les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn [1], on peut connaître totalement l'état d'un système électronique en déterminant sa densité électronique.

Pour obtenir la densité de modes qui est la densité d'état par unité de fréquence, on utilise la relation de dispersion entre l'énergie et le vecteur d'ondes (\vec{q}).

La compréhension des phénomènes physiques passe par l'étude des fluctuations. Il est même possible d'étudier les phénomènes de transport par l'intermédiaire des fluctuations, elle nous permet l'étude des transitions de phase [2] ainsi que la détermination de la chaleur spécifique, la conductivité électrique, la supraconductivité, en passant par la conductivité thermique. La modélisation du transport thermique revêt une importance primordiale [3].

En effet, dans le contexte technologique actuel où la miniaturisation, de plus en plus agressive des dimensions des dispositifs électroniques, induit des problèmes d'échauffement majeurs.

L'intérêt majeur que constitue l'étude de la dynamique vibrationnelle est le transport des phonons qui sont les quanta d'énergie des modes de vibration du réseau cristallin.

Dans ce chapitre, nous avons calculé les densités spectrales locales des sites irréductibles appartenant aux zones perturbées, en exploitant l'opérateur des fonctions de Green associé à la méthode de raccordement [4-11].

La démarche a permis spécifiquement de calculer analytiquement et numériquement les densités spectrales et les LDOS associées aux états vibrationnels des atomes (densités d'états phononiques) et les LDOS associées aux états processionnels des spins (densités d'états magnoniques) localisés dans les zones inhomogènes, à savoir le cas de cisaillements pour deux angles différents $\alpha = 45^\circ$ et 30° , ainsi que deux cas de lacunes, (lacunes au centre, et lacunes aux extrémités). Dans le cas des magnons, nous avons vérifié l'impact de l'intensité du spin sur la densité d'état, en simulant les trois valeurs de S (0.9, 1.0, 1.1).

Dans le cas des phonons, nous avons étudié les cas de l'adoucissement, l'homogénéité et le durcissement des constantes de force dans la zone inhomogène. Ceci représente une véritable contribution théorique à l'étude des structures perturbées. Les courbes des densités d'états locales sont exprimées en unité arbitraire, et sont tracées en fonction de la fréquence normalisée Ω .

II) Densités spectrales et densités d'états - Rappels

II.1) Formalisme théorique décrivant les densités phononiques et magnoniques

a) Les éléments de la matrice des fonctions de Green

L'opérateur de Green, noté G , est obtenu à partir de la matrice dynamique des systèmes perturbés D , en suivant les étapes suivantes selon le type d'excitation élémentaire :

- dans le cas de la dynamique du réseau

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (4.1a)$$

- dans le cas des excitations des spins

$$G(\omega) = [\omega I - D]^{-1} \quad (4.1b)$$

Pour expliciter les éléments des matrices D et $G(\omega^2)$, de rang s , nous choisissons la base des

$$s \text{ vecteurs } |e_n\rangle, \text{ que nous définissons par : } |e_n\rangle = \begin{pmatrix} : \\ \delta_{nm} \\ : \end{pmatrix} \begin{matrix} I \\ m \\ I \end{matrix}$$

Nous signalons que $s = 3N$, dans le cas des phonons et $s = N$, dans le cas des magnons.

Soit : $\langle e_n | = [\dots \delta_{nm}^m \dots]$, avec n et $m = 1, \dots, s$.

Désignons par $\langle e_n | e_n \rangle$ le produit scalaire des vecteurs $|e_n\rangle$ et $\langle e_n |$. Alors, nous écrivons

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

La relation d'ortho-normalité des vecteurs $|e_n\rangle$ est définie par

$$\langle e_n | e_n \rangle = \delta_{nm} \quad (4.2)$$

De même, l'équation de fermeture est donnée par

$$I = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k| \quad (4.3)$$

En utilisant l'équation (4.2), les éléments de $I = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k|$ dans la base des vecteurs $|e_n\rangle$ se mettent sous la forme

$$\langle e_n | \left[\sum_k |e_k\rangle\langle e_k| \right] |e_n\rangle = \sum_k \langle e_n | e_k \rangle \langle e_k | e_n \rangle = \sum_k \delta_{nk} \delta_{kn} = \delta_{nn}$$

Soit $|u_p\rangle$, avec $p = 1, \dots, s$, les vecteurs propres de la matrice dynamique D du système perturbé et ω_p^2 les valeurs propres correspondantes (phonons) et ω_p les valeurs propres (magnons).

En tenant compte du fait que : $\langle u_p | u_p \rangle = 1$ (la relation est normalisée). Et de la définition des vecteurs propres, nous pouvons écrire, respectivement, pour les excitations atomiques et magnétiques : $\langle u_{p'} | D | u_p \rangle = \omega_p^2 \langle u_{p'} | u_p \rangle$ et $\langle u_{p'} | D | u_p \rangle = \omega_p \langle u_{p'} | u_p \rangle$.

Comme la matrice dynamique D est diagonale, dans la base des vecteurs propres, le produit scalaire suivant $\langle u_{p'} | u_p \rangle$ est nul si et seulement si $|u_p\rangle \neq |u_{p'}\rangle$.

D'où l'égalité

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta_{pp'} \quad (4.4)$$

b) Calcul des éléments de l'opérateur de Green G

Afin d'exprimer les éléments $\langle e_n | G | e_m \rangle$ de la matrice G en fonction des valeurs et des vecteurs propres de la matrice dynamique D , nous introduisons la matrice X de passage entre les deux bases vectorielles $|u_p\rangle$ et $|e_n\rangle$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.5a)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = X^{-1} \begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.5b)$$

D'après (4.5a), un vecteur propre $|u_p\rangle$ est une combinaison linéaire des s vecteurs $|e_n\rangle$

$$|u_p\rangle = \sum_{n=1}^s \langle e_p | X | e_n \rangle |e_n\rangle \quad (4.6)$$

Où l'élément $\langle e_p | X | e_n \rangle$, de la matrice X , représente la projection du vecteur propre $|u_p\rangle$ sur le vecteur $|e_n\rangle$.

En effet, d'après l'équation (4.6), nous aboutissons à la relation

$$\langle e_i | u_p \rangle = \sum_{n=1}^{N_0} \langle e_p | X | e_n \rangle \langle e_k | e_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_0} \langle e_p | X | e_n \rangle \delta_{kn}$$

Ce qui entraîne l'équation

$$\langle e_k | u_p \rangle = \langle e_p | X | e_k \rangle \quad (4.7)$$

Pour prouver que la matrice X est unitaire ($X^+ = X^{-1}$), nous exprimons, le produit scalaire $\langle u_{p'} | u_p \rangle$ en fonction de X et X^+ (en se basant sur les équations (4.3) et (4.6)).

$$\begin{aligned} \langle u_{p'} | u_p \rangle &= \sum_n \sum_{n'} \langle e_n | X^+ | e_{p'} \rangle \langle e_{p'} | X | e_m \rangle \delta_{nm} \\ \langle u_{p'} | u_p \rangle &= \sum_n \langle e_{p'} | X | e_m \rangle \langle e_m | X^+ | e_{p'} \rangle = \langle e_{p'} | X \cdot X^+ | e_{p'} \rangle \end{aligned}$$

D'après l'équation (4.4), nous obtenons

$$\langle e_{p'} | X \cdot X^+ | e_{p'} \rangle = \delta_{pp'} \quad (4.8)$$

Nous déduisons que la matrice X , définie par (4.5a), vérifie la relation :

$$X \cdot X^+ = I \Rightarrow X^+ = X^{-1} \quad (4.9)$$

Cette propriété de la matrice X permet d'établir, pour la base des vecteurs propres, la relation de fermeture qui s'écrit :

$$I = \sum_p |u_p\rangle\langle u_p| \quad (4.10)$$

En effet, d'après les deux équations (4.7) - (4.8) :

$$\begin{aligned} \langle e_n | \sum_p |u_p\rangle\langle u_p| e_m \rangle &= \sum_p \langle e_n | e_p \rangle \langle e_p | e_m \rangle = \sum_p \langle e_p | X | e_n \rangle \langle e_p | X | e_m \rangle \\ &= \sum_p \langle e_p | X^+ | e_n \rangle \langle e_p | X | e_m \rangle = \langle e_n | X^+ X | e_m \rangle = \delta_{nm} \end{aligned}$$

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

$$\langle e_n | L | e_m \rangle = \omega_n^2 \delta_{nm} \quad (4.11a)$$

$$\langle e_n | L | e_m \rangle = \omega_n \delta_{nm} \quad (4.11b)$$

En utilisant l'équation (4.3), les éléments de la matrice $[X^+ L X]$ sont explicités comme suit :

$$\langle e_n | X^+ L X | e_m \rangle = \langle e_n | X^+ I L I X | e_m \rangle = \sum_i \sum_j \langle e_n | X^+ | e_i \rangle \langle e_i | L | e_j \rangle \langle e_j | X | e_m \rangle$$

D'autre part,

$$\sum_i \sum_j \langle e_n | X^+ | e_i \rangle \langle e_i | L | e_j \rangle \langle e_j | X | e_m \rangle = \sum_i \omega_i^2 \langle e_i | X | e_n \rangle^* \langle e_i | X | e_m \rangle \quad (\text{Cas des phonons}).$$

$$\sum_i \sum_j \langle e_n | X^+ | e_i \rangle \langle e_i | L | e_j \rangle \langle e_j | X | e_m \rangle = \sum_i \omega_i \langle e_i | X | e_n \rangle^* \langle e_i | X | e_m \rangle \quad (\text{Cas des magnons}).$$

En tenant compte des équations (4.7), (4.10) et de la définition des vecteurs $|u_p\rangle$, on obtient :

$$\langle e_m | X^+ L X | e_n \rangle = \sum_i \langle e_m | D | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle = \langle e_m | D | e_n \rangle$$

De plus, si la matrice dynamique D est symétrique, elle vérifie alors la relation :

$$D = X^+ L X \quad (4.12)$$

D'après (4.1) et (4.10), la matrice des fonctions de Green G peut s'exprimer en fonction des trois matrices : X , X^+ et L :

$$G = [\omega^2 I - D]^{-1} \Rightarrow G = [\omega^2 I - X^+ L X]^{-1} = [X^+ (\omega^2 I - L) X]^{-1} \quad (\text{Dynamique des atomes}),$$

$$G = [\omega I - D]^{-1} \Rightarrow G = [\omega I - X^+ L X]^{-1} = [X^+ (\omega I - L) X]^{-1} \quad (\text{Dynamique des spins}).$$

Nous déduisons

$$G(\omega^2) = X^+ [\omega^2 I - L]^{-1} X \quad \text{et} \quad G(\omega) = X^+ [\omega I - L]^{-1} X \quad (4.13)$$

D'après (4.11), les éléments des matrices $(\omega^2 I - L)^{-1}$ et $(\omega I - L)^{-1}$ peuvent être réécrits, respectivement, par

$$\langle e_n | [\omega^2 I - L]^{-1} | e_m \rangle = \frac{\delta_{nm}}{\omega^2 - \omega_m^2} \quad (4.14a)$$

$$\langle e_n | [\omega I - L]^{-1} | e_m \rangle = \frac{\delta_{nm}}{\omega - \omega_m} \quad (4.14b)$$

En combinant les trois équations (4.3), (4.13) et (4.14), les éléments des matrices G s'écriront sous la forme suivante

$$\langle e_n | [\omega^2 I - L]^{-1} | e_m \rangle \equiv \langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle = \sum_p \sum_{p'} \langle e_n | u_p \rangle \frac{\delta_{nm}}{\omega^2 - \omega_m^2} \langle e_m | u_{p'} \rangle = \sum_p \frac{\langle e_n | u_p \rangle \langle e_m | u_{p'} \rangle}{\omega^2 - \omega_m^2} \quad (4.15a)$$

$$\langle e_n | [\omega I - L]^{-1} | e_m \rangle \equiv \langle e_n | G(\omega) | e_m \rangle = \sum_p \sum_{p'} \langle e_n | u_p \rangle \frac{\delta_{nm}}{\omega - \omega_m} \langle e_m | u_{p'} \rangle = \sum_p \frac{\langle e_n | u_p \rangle \langle e_m | u_{p'} \rangle}{\omega - \omega_m} \quad (4.15b)$$

D'après (4.15), les valeurs propres de la matrice D représentent les pôles des éléments de l'opérateur G . L'opérateur de Green est obtenu à partir de la matrice carrée D (qui résulte du produit entre la matrice du film perturbé et de la matrice de raccordement).

c) Densités spectrales

Désignons par $\gamma(\omega)$ le spectre de fréquence du système

$$\gamma(\omega) = \sum_p \delta(\omega - \omega_p) \quad (4.16)$$

La notation $\gamma(\omega)$ représente, physiquement, le nombre d'états de vibration (pour la dynamique du réseau) ou de précession (dynamique des spins) à la fréquence ω .

D'autre part $\gamma(\omega)$ peut être exprimée aussi par l'équation suivante

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum \gamma_n(\omega) \quad (4.17)$$

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

$$\gamma_n(\omega) = \sum_p \langle e_n | u_p \rangle \delta(\omega - \omega_p) \quad (4.18)$$

$\gamma_n(\omega)$ correspond à la somme des carrés des amplitudes des sites excitées, suivant une direction cartésienne, de tous les modes propres de fréquence $\omega_p = \omega$.

La densité spectrale $\gamma_n(\omega)$, dans la base formée par les vecteurs propres, peut être exprimée par la relation

$$\gamma_n(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \quad (4.19)$$

Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire ε à la variable *énergie* (ou bien la pulsation du mouvement).

En tenant compte de la limite quand ε tend vers 0, on trouve que

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} \langle e_n | G(\omega + j\varepsilon) | e_n \rangle] \quad (4.20)$$

La matrice de densité spectrale, pour un vecteur d'onde parallèle à la zone perturbée, est alors donnée par la relation suivante

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\omega) = \omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\omega^2 - \omega_m^2) = 2\omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{ll'}(\omega^2 + j\varepsilon)]) \quad (4.21a)$$

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\omega) = 2\omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{ll'}(\omega + j\varepsilon)]) \quad (4.21b)$$

Où (l et l') représentent deux sites atomiques différents, α et β les directions cartésiennes et $P_{\alpha m}^l$ est la composante α du vecteur décrivant l'amplitude du mouvement du site l , selon le mode d'énergie ω_m .

d) Densités d'états

La densité d'états des phonons (idem pour les magnons) représente le nombre de modes normaux dans l'intervalle de fréquence $[\omega, \omega + d\omega]$. Elle donne une cartographie des modes prépondérants dans l'espace des fréquences [11], donc les phonons (magnons) qui seront le plus présents dans le système.

- La densité d'état phononique correspond à la somme de la trace des matrices des densités spectrales phononiques. Elle s'écrit comme

$$N(\omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{l,l'}(\omega) = \left(-\frac{2\omega}{\pi}\right) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im}[G_{\alpha\alpha}^{ll'}(\omega^2 + j\varepsilon)]) \quad (4.22a)$$

- La densité d'état magnonique correspond à la somme de la trace des matrices des densités spectrales magnoniques. Elle est exprimée par

$$N(\omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{p,p'}(\omega) = (-1/\pi) \sum_{p\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im}[G_{\alpha\beta}^{pp'}(\omega + j\varepsilon)]) \quad (4.22b)$$

Remarque

Les équations précédentes restent les mêmes, si nous introduisons les énergies normalisées Ω au lieu de la notation ω .

III) Résultats des spectres LDOS des sites irréductibles dans une multicouche composite

III.1) Résultats relatifs aux spectres des densités d'états magnoniques

La densité d'état locale (LDOS) est exprimée en unité arbitraire, en fonction de la fréquence normalisée Ω , pour les différents sites irréductibles (zones perturbées). Les sites irréductibles sont numérotés sur les figures (3.1), (3.8) et (3.12), du chapitre 3.

Pour chaque site de spin, nous avons étudié les trois possibilités de l'intensité du vecteur spin des monocouches A et B. Nous avons simulé : $S = S_B/S_A = 0.9, 1.0, 1.1$.

A chaque situation de spin S , nous avons analysé l'impact de l'échange magnétique dans les zones perturbées, de l'adoucissement au durcissement, en passant par le cas homogène. Nous avons simulé $J_d/J = 0.9, 1.0, 1.1$. Les résultats LDOS magnoniques sont tracés ci-dessous :

i) Pour le cisaillement à 45° , les spectres des LDOS des différents spins situés dans la zone perturbée sont donnés sur les figures : (4.1.1a), (4.1.1b), (4.1.1c), telles que les lettres (a, b, c) correspondent aux intensités des spins (0.9, 1.0, 1.1), respectivement.

ii) Pour le cisaillement à 30° , de la même manière que précédemment, les résultats sont plotés sur les figures : (4.1.2a), (4.1.2b), (4.1.2c).

iii) Pour les lacunes au centre du film composite, les résultats sont tracés sur les figures : (4.1.3a), (4.1.3b), (4.1.3c).

iv) Pour les lacunes aux extrémités du film composite, les résultats sont tracés sur les figures : (4.1.4a), (4.1.4b), (4.1.4c).

NB : pour alléger l'écriture on adopte dans l'interprétation la notation suivante pour les trois cas (adoucissement (A), homogène (H), durcissement (D)).

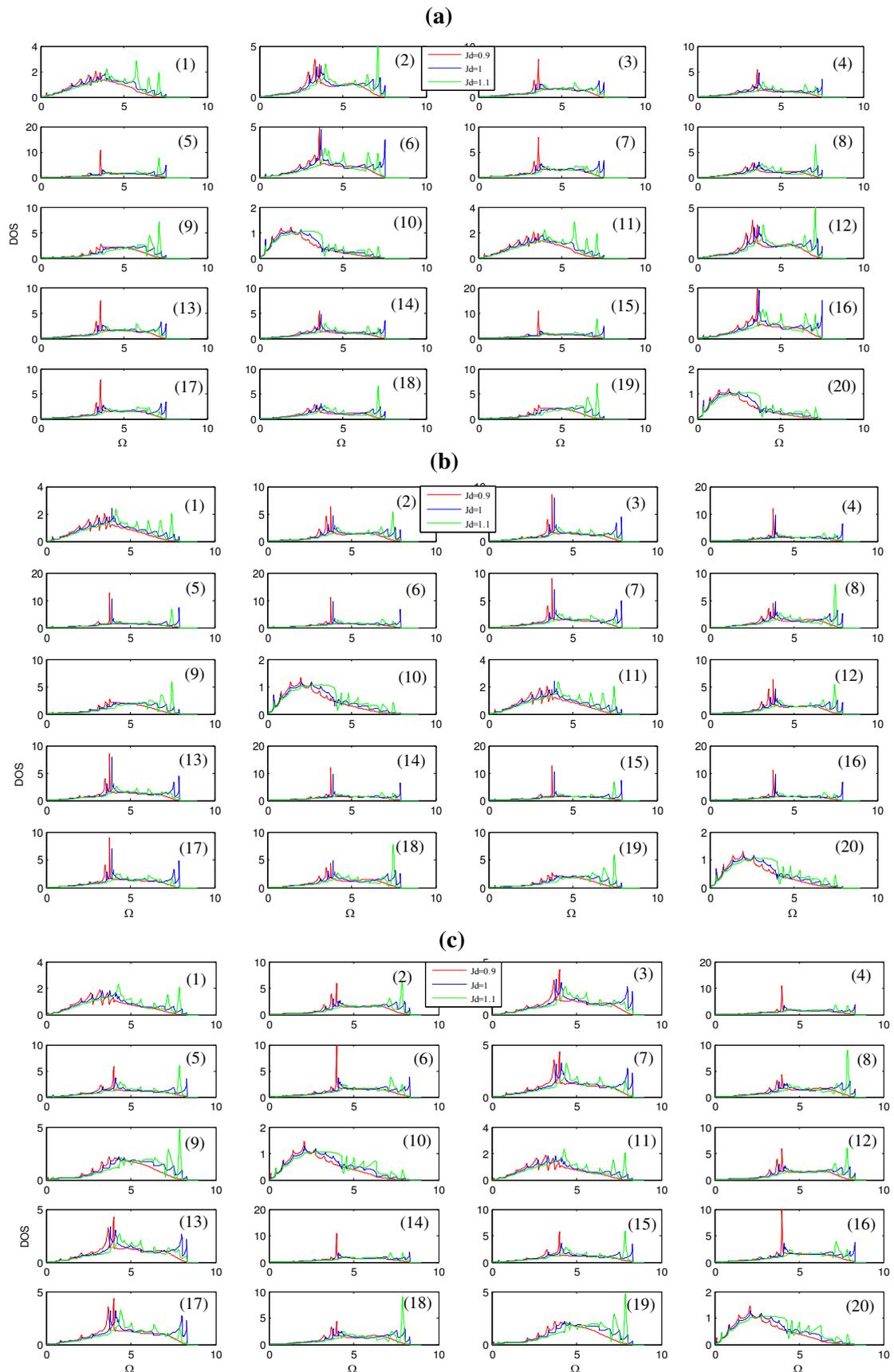
III.1.1) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 45° 

Figure (4.1.1) : Densités d'états magnoniques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le film composite présentant un cisaillement $\alpha = 45^\circ$. (a, b, c) correspondent à $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 .

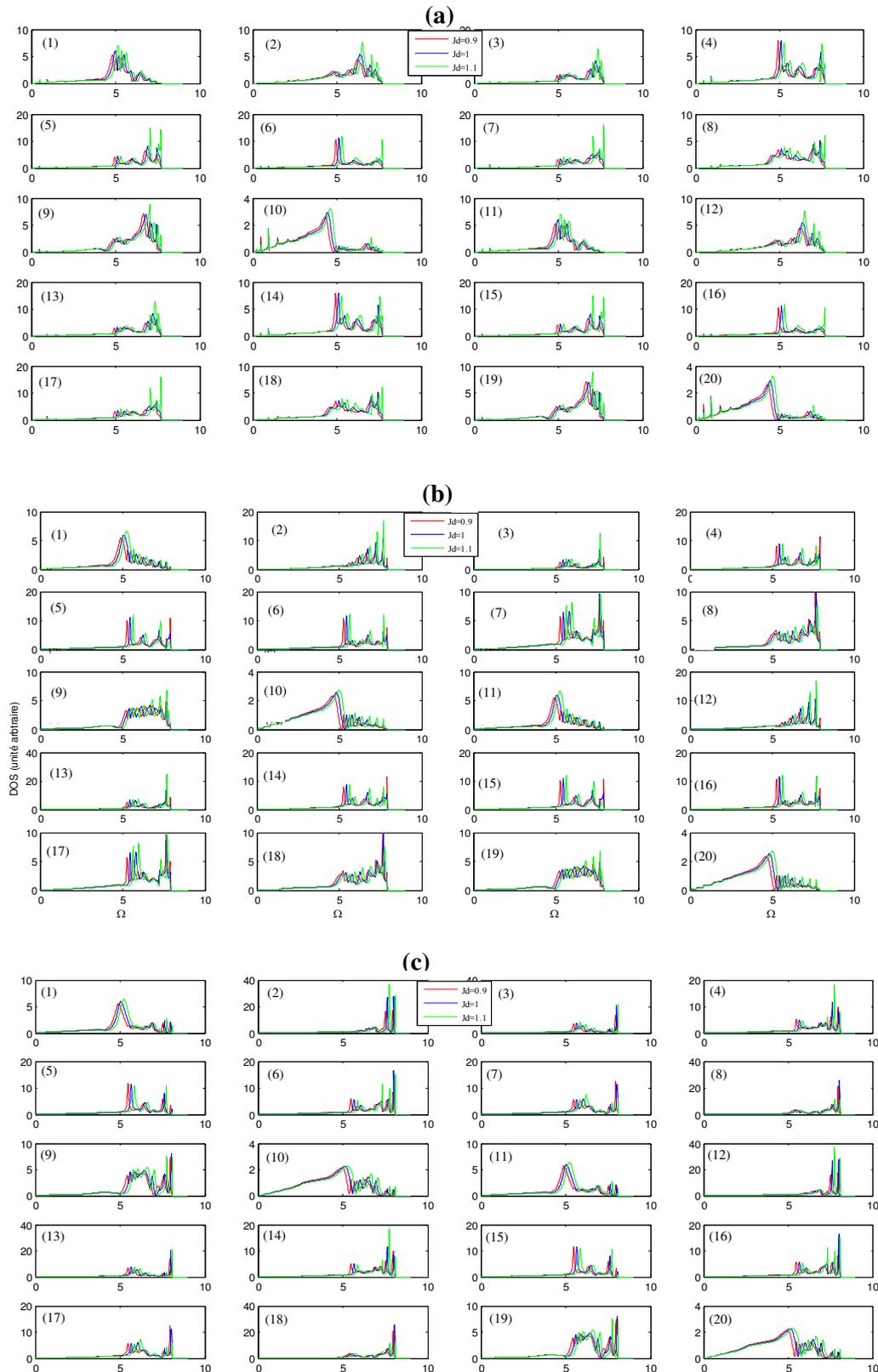
III.1.2) LDOS magnoniques dans le cas d'un cisaillement à 30° 

Figure (4.1.2) : Densités d'états magnoniques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le film composite présentant un cisaillement $\alpha = 30^\circ$.

Les figures (a, b, c) correspondent aux cas où $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 , respectivement.

III.1.3) LDOS en présence des lacunes au centre du film

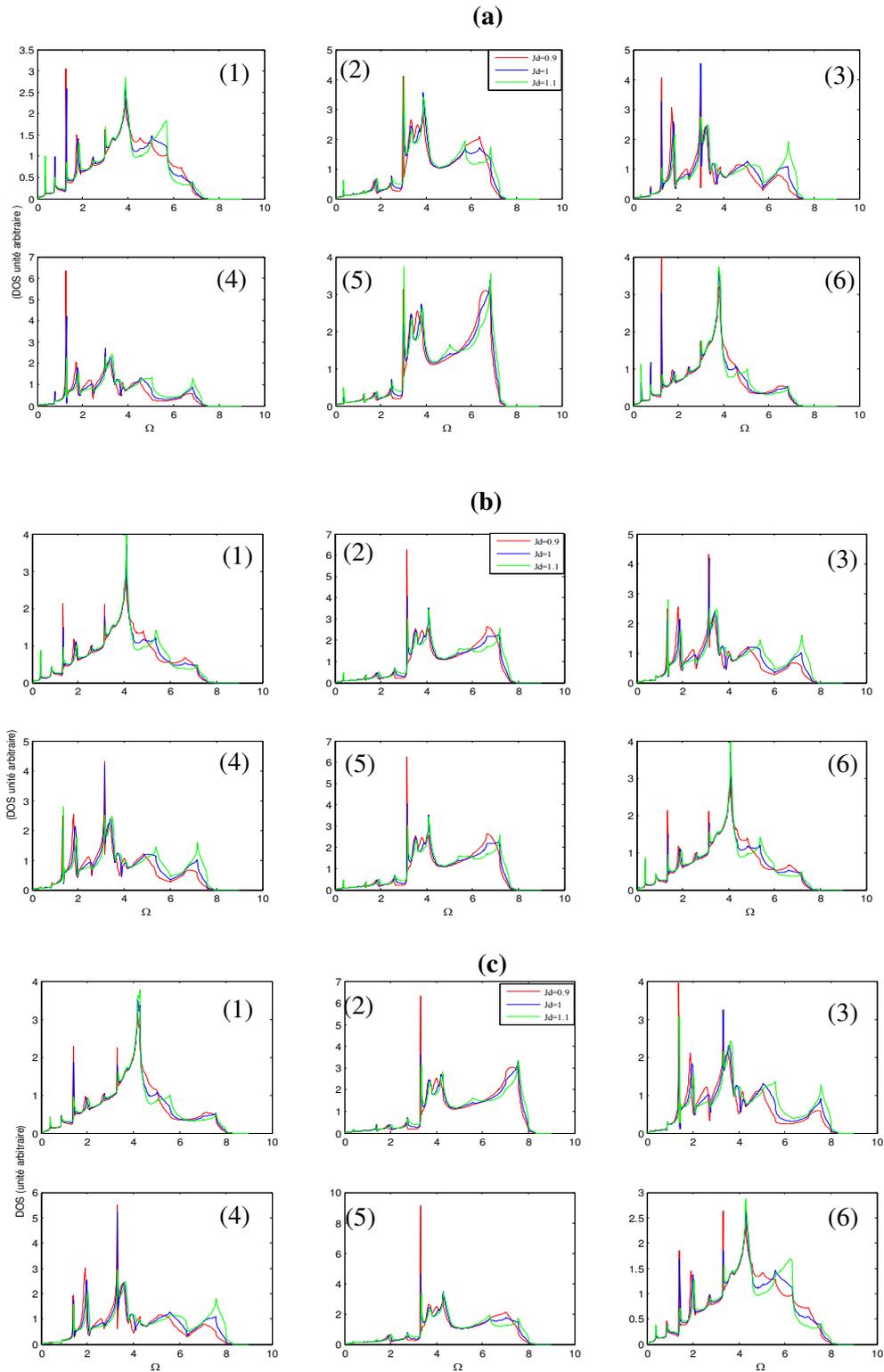


Figure (4.1.3) : Densités d'états magnoniques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le film composite en présence de lacunes au centre du film.

Les figures (a, b, c) correspondent aux cas où $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 , respectivement.

III.1.4) LDOS en présence de lacunes aux extrémités

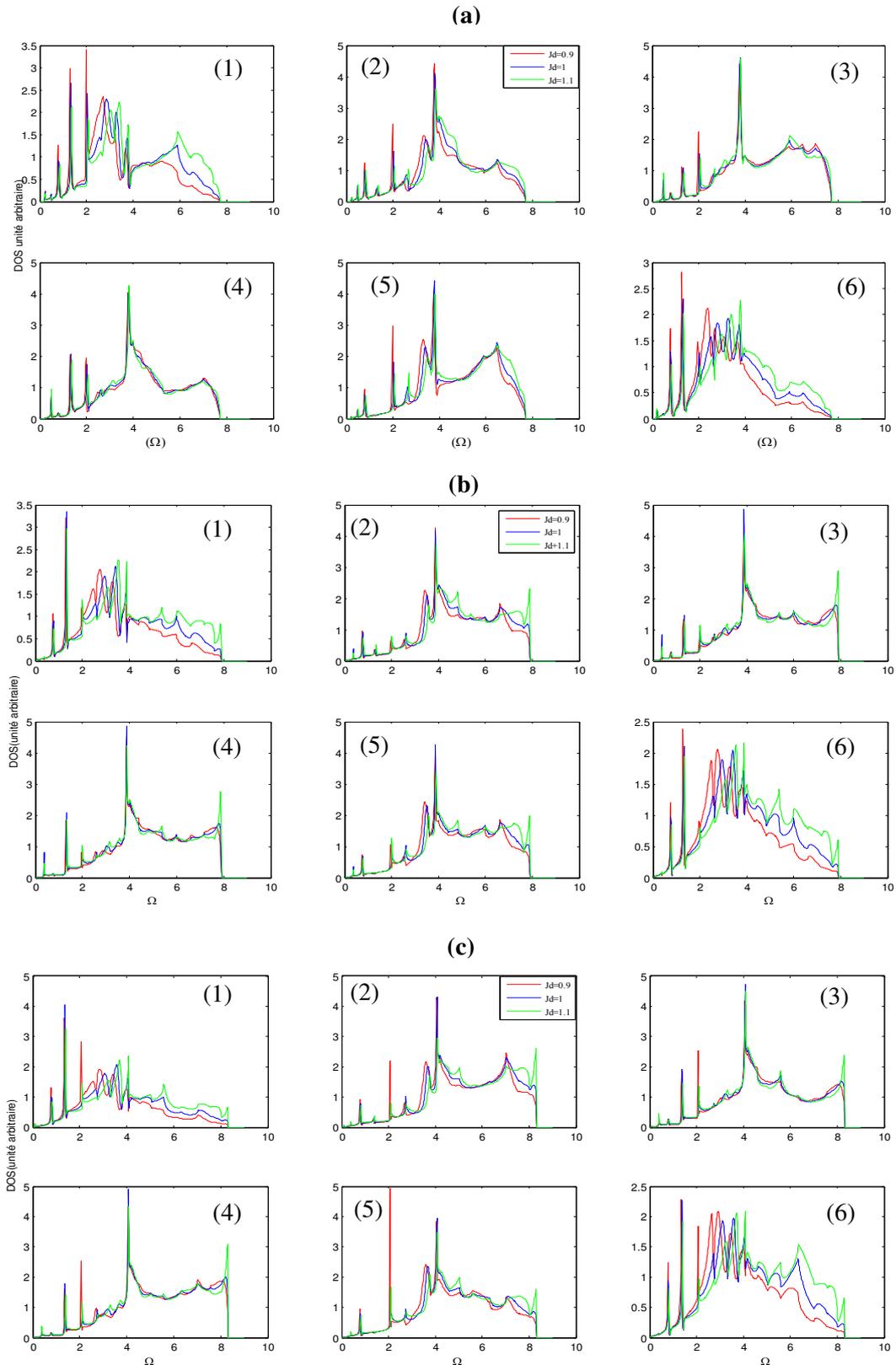


Figure (4.1.4) : Densités d'états magnoniques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le film composite en présence de lacunes aux extrémités du film.

Les figures (a, b, c) correspondent aux cas où $S = 0.9, 1.0$ et 1.1 , respectivement.

III.2) Résultats des spectres relatifs aux densités d'états phononiques

Dans cette partie, nous avons calculé et représenté les densités d'états locales phononiques (LDOS), en unité arbitraire, en fonction de la fréquence normalisée Ω , pour les différents sites irréductibles de la zone perturbée du film composite. Pour chaque site atomique, nous avons étudié les trois possibilités qui expriment la différence de masse entre les monocouches A et B. Nous avons simulé : $m = m_B/m_A = 0.9, 1.0, 1.1$ (masse légère, comparables, lourde).

A chaque cas de figure de masse m , nous avons analysé aussi l'effet des constantes de force, dans les zones perturbées, de l'adoucissement au durcissement, en passant par le cas homogène. Nous avons examiné les rapports suivants : $k_d/k = 0.9, 1.0, 1.1$.

Les résultats des LDOS phononiques sont donnés comme suit :

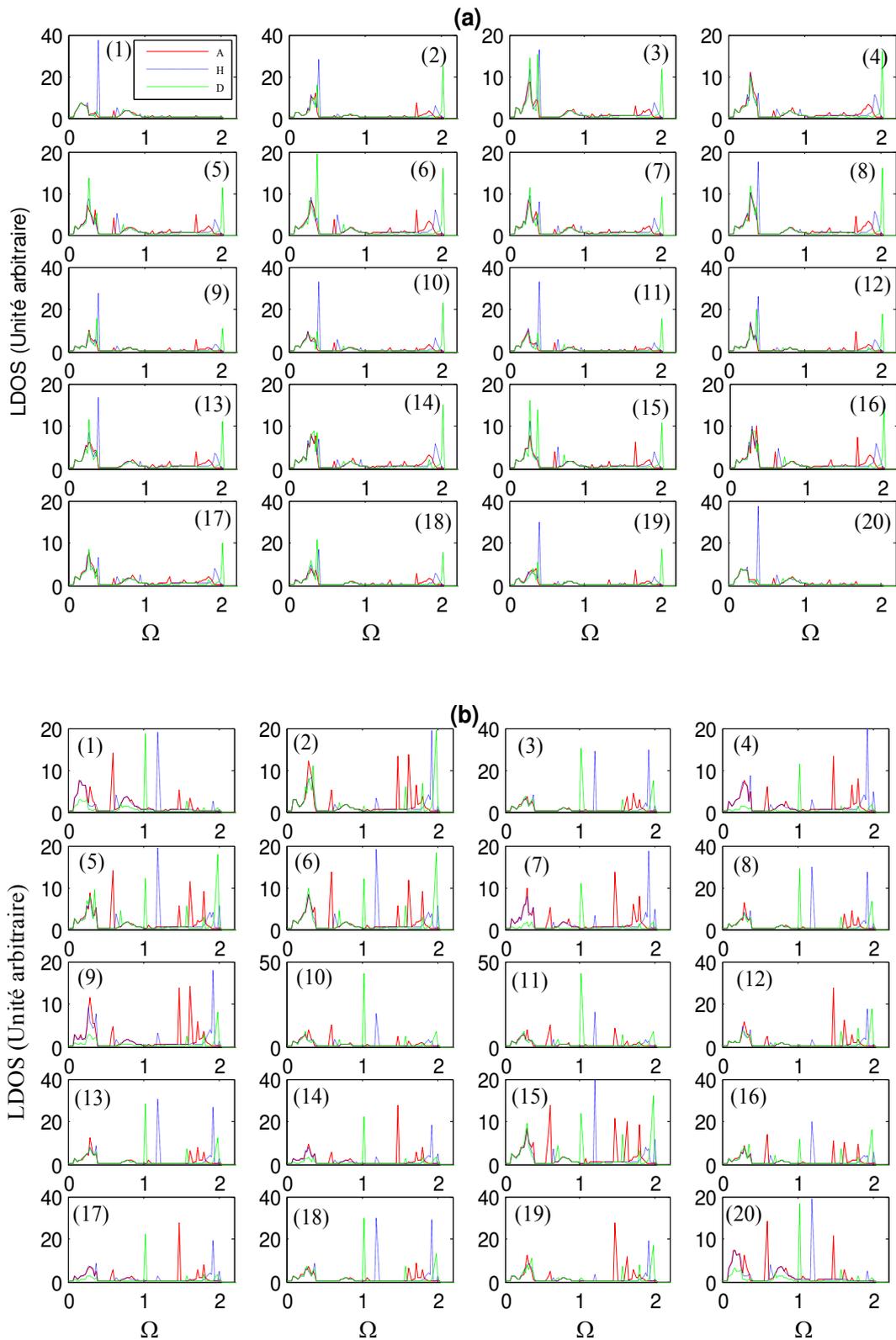
i) Pour le cisaillement à 45° , les spectres des LDOS phononiques des différents sites atomiques positionnés dans la zone perturbée sont donnés sur les figures : (4.2.1a), (4.2.1b), (4.2.1c), telles que les lettres (a, b, c) correspondent aux défauts de masse $m = 0.9, 1.0, 1.1$, dans l'ordre.

ii) Pour le cisaillement à 30° , de la même manière que précédemment, les résultats sont plotés sur les figures : (4.2.2a), (4.2.2b), (4.2.2c).

iii) Pour les lacunes au centre du film composite, les résultats sont tracés sur les figures : (4.2.3a), (4.2.3b), (4.2.3c).

iv) Pour les lacunes aux extrémités du film composite, les résultats sont tracés sur les figures : (4.2.4a), (4.2.4b), (4.2.4c).

III.2.1) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 45°



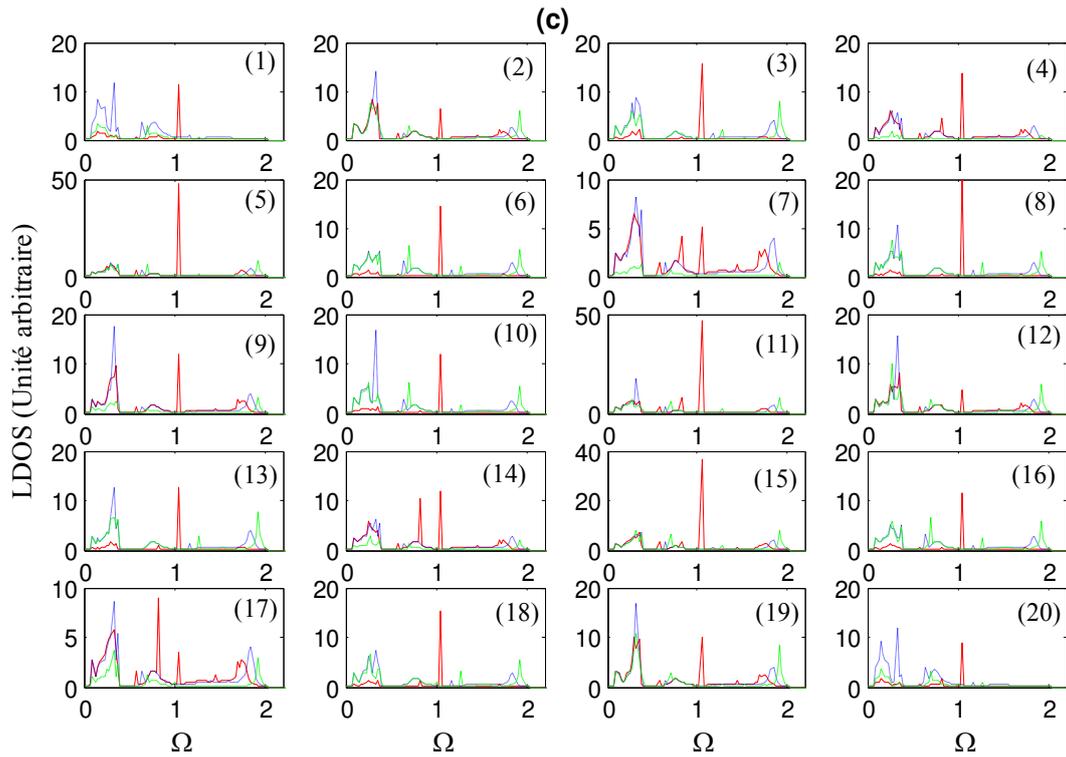
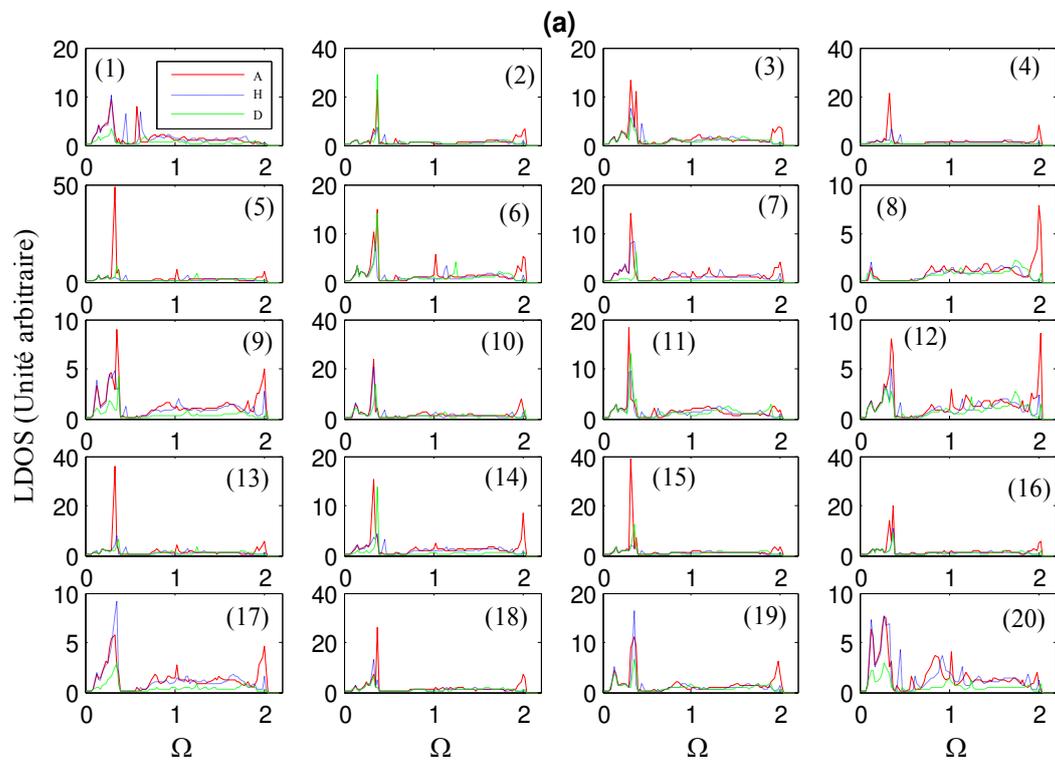


Figure (4.2.1) : Densités d'états phononiques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le cas d'un cisaillement $\alpha = 45^\circ$. Les figures (a, b, c) correspondent, respectivement, à : la masse légère, masses comparables, et la masse lourde.

III.2.2) LDOS phononiques dans le cas d'un cisaillement à 30°



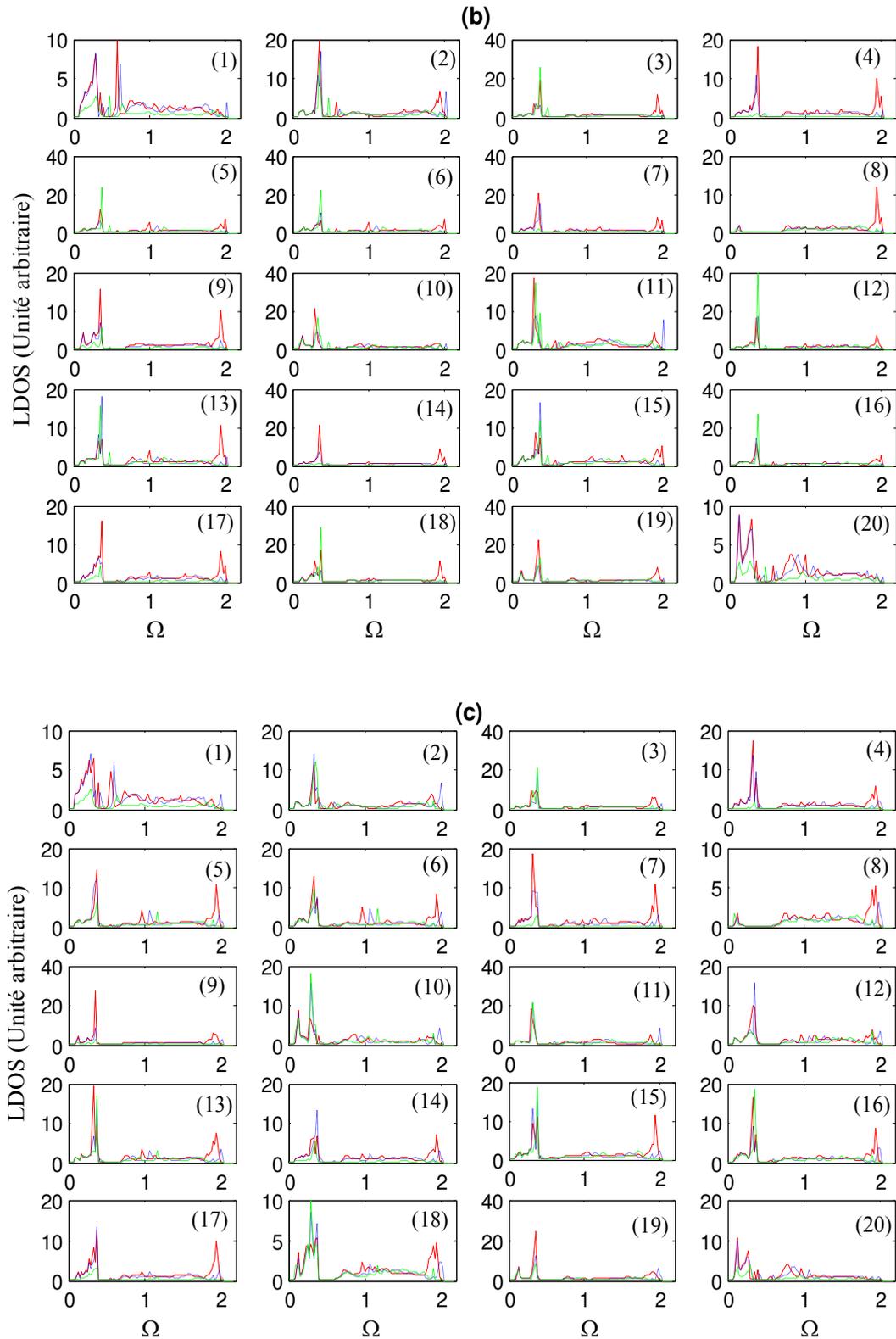


Figure (4.2.2) : Densités d'états phononiques locales (LDOS) des sites irréductibles, dans le cas d'un cisaillement $\alpha = 30^\circ$. Les figures (a, b, c) correspondent, respectivement, à : la masse légère, masses comparables, et la masse lourde.

III.2.3) LDOS phononiques en présence de lacunes au centre

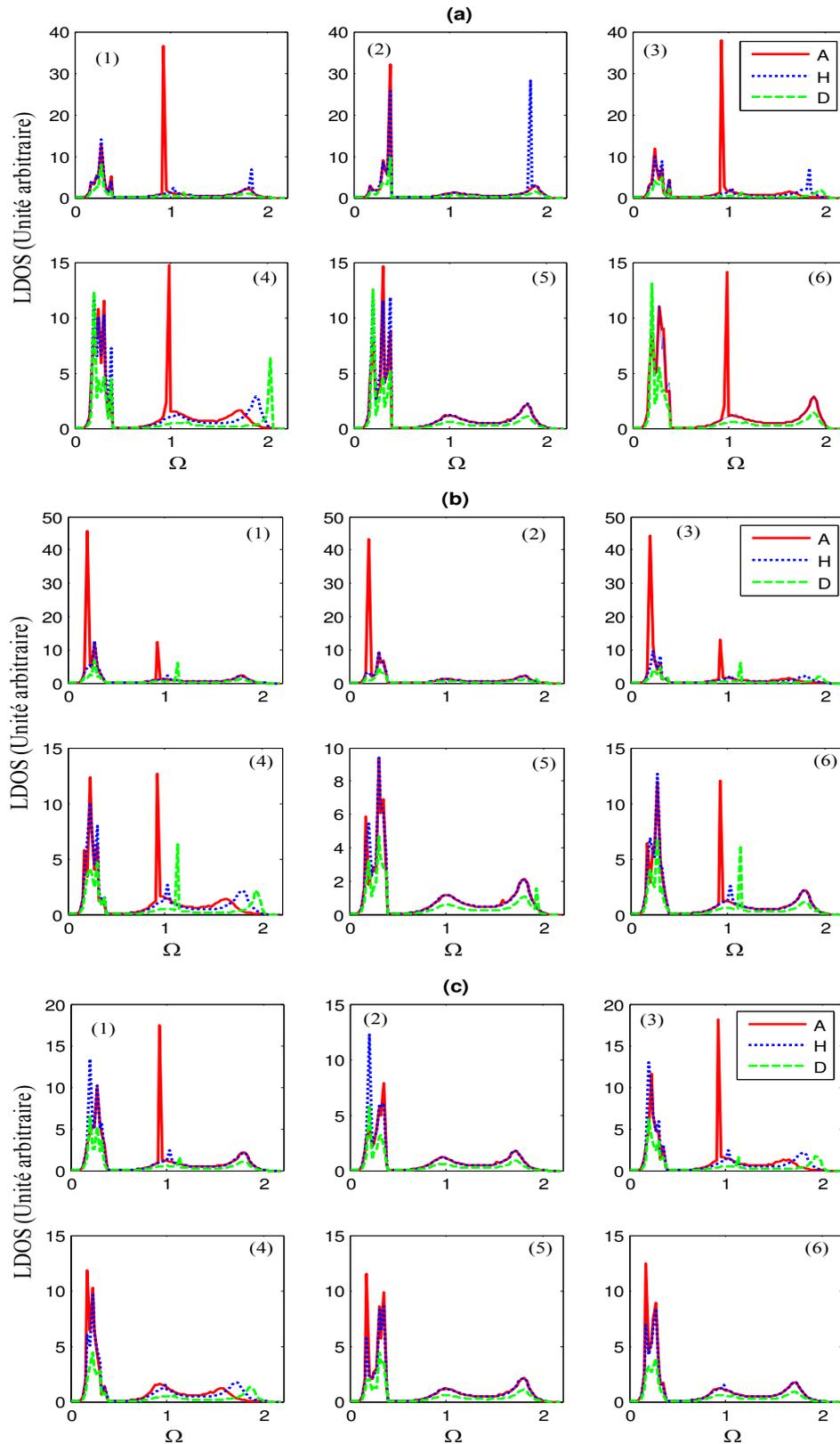


Figure (4.2.3) : Densités d'états phononiques locales (LDOS) des sites irréductibles, en présence de lacunes au centre du film. Les figures (a, b, c) correspondent, respectivement, à : la masse légère, masses comparables, et la masse lourde.

III.2.4) LDOS phononiques en présence de lacunes aux extrémités

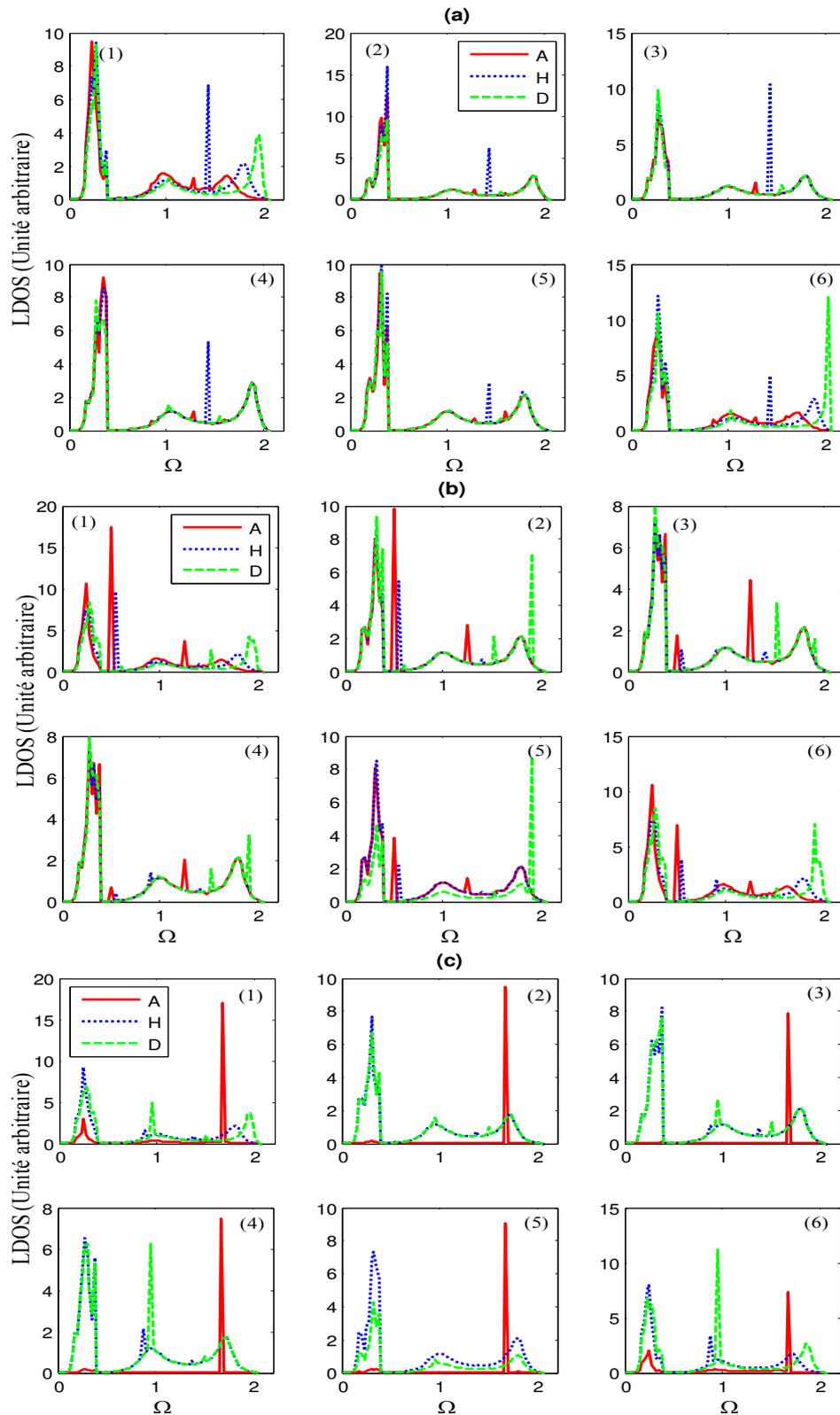


Figure (4.2.4) : Densités d'états phononiques locales (LDOS) des sites irréductibles, en présence de lacunes aux extrémités du film. Les figures (a, b, c) correspondent, respectivement, à : la masse légère, masses comparables, et la masse lourde.

IV) Interprétation et discussion des résultats LDOS obtenus

IV.1) Cas des magnons

- cisaillement d'un angle $\alpha = 45^\circ$

Les courbes des LDOS magnoniques, des quatre inhomogénéités étudiés dans cette thèse, sont représentées sur les figures (4.1.1), (4.1.2), (4.1.3) et (4.1.4).

Les LDOS du cisaillement à 45° sont représentées sur la figure (4.1.1). Dans le premier cas qui décrit l'adoucissement des intensités du spin ($S_B < S_A$ de la Fig. (4.1.1a)), nous remarquons que dans l'ensemble des trois cas d'interactions simulés (variation des intégrales d'échange - couplages notés A, H, D), les spectres des LDOS sont faibles sur la partie de l'intervalle de fréquence $\Omega \in [0.00, 2.38]$. Et cela pour les sites de spin numérotés par (3), (5), (7), (9), (13), (15), (17), (19), où nous observons l'apparition d'oscillations de Fabry-Pérot [12-13], positionnées après un pic d'oscillation de type Fano [14-15] à la fréquence $\Omega = 2.44$. Ces oscillations se terminent, par la suite, par des pics de type Fano dans le cas de durcissement des interactions, à la fréquence $\Omega = 6.44$. Puis, elles s'annulent dans les deux autres cas.

Le spectre de LDOS est très riche en oscillations, sur la même plage des fréquences permises par le système, et ce pour les sites notés (1), (2), (4), (6), (8), (10), (11), (12), (14), (16), (18), (20). Ceci s'explique par le fait que ces sites de spin sont situés dans la zone perturbée et chaque site présente un environnement (une coordinence) différent de celui des sites du film composite parfait.

Dans le cas du durcissement des interactions, nous constatons des pics de type Fano aux fréquences $\Omega = 5.18$, pour les sites (1) et (11) et à $\Omega = 6.44$, pour les sites (2), (12), (6), (16).

D'autre part, nous remarquons que les amplitudes des LDOS sont plus importantes aux sites de spin (8), (18), (10), (20).

Dans le cas où les spins des monocouches sont comparables ($S = 1$), à basse fréquences, spécifiquement dans l'intervalle $\Omega \in [0.00, 4.16]$, les LDOS des spins du bord, c-à-d : sites (1), (10), (11), (20), sont plus élevées que les autres. Les fluctuations des spectres du cas $S = 1$ deviennent plus stables à haute fréquence, dans l'intervalle de fréquence $\Omega \in [4.16, 7.86]$. Le phénomène s'observe inversement dans le cas où $S < 1$.

Plus loin dans de la zone perturbée, les fluctuations des spectres de la densité d'état sont régulières et ne présentent pas de pics de type Fabry-Pérot.

Certains pics ne changent pas de position, dans le cas où $S = 1$ et $S < 1$. Ces fréquences sont des fréquences particulières et intrinsèques au système. Elles sont visibles sur les LDOS des sites (3), (4), (5), (6), (7), (13), (14), (15), (16), (17).

Par contre, les courbes des sites (2), (8), (9), (12), (18), (19) sont partagées en deux parties. La première partie, définissant les basses fréquences, $\Omega \in [0.00, 5.10]$, où les pics des cas adoucissement (A) homogène (H) et durcissement (D) sont plutôt stables. La partie restante de l'intervalle de propagation des magnons du guide d'ondes de spin parfait, c'est l'inverse du cas du durcissement qui se produit.

L'augmentation de l'intensité du spin, ($S > 1$), a pour effet d'augmenter la densité des basses fréquences de tous les sites jusqu'à la fréquence ($\Omega = 4.66$), où nous trouvons un pic dans le cas de durcissement, puis les spectres descendent jusqu'à un niveau minimum, pour les sites (1), (3), (5), (7), (9), (10), (11), (13), (15), (17), (19), (20). Mais, pas pour les sites restants (2), (4), (6), (8), (12), (14), (16), (18), où la densité est pratiquement nulle, à basse fréquence, dans l'intervalle $\Omega \in [0.00, 5.08]$.

Les courbes présentent des oscillations qui ont la forme de Fabry-Pérot. Et elles se terminent par un pic de type Fano qui est réduit dans le cas des sites de bords (1), (11), (10) et (20).

Nous observons que l'intensité élevée, de S , a provoqué l'augmentation des fluctuations de la densité d'état.

- cisaillement d'un angle $\alpha = 30^\circ$

Les courbes de la figure (4.1.2) correspondent au cisaillement à 30° ,

Dans les cas des sites de surfaces (1) et (11) la densité est nulle elle présente un pic au point $\Omega = 5.52$, pour les trois cas envisagés (A-H-D). Nous appelons cette fréquence, une fréquence collective de vibration.

Ce pic diminue de hauteur, et nous notons un autre pic plus intense à la fréquence $\Omega = 3.10$, pour les sites (2), (12), (8), (18), et dans ces courbes la densité s'élève légèrement.

Nous retrouvons, toujours, ce pic aux sites de spin numérotés par (4), (6), (10), (14), (20) alors que la densité s'annule. Pour les autres sites, (3), (5), (7), (9), (13), (15), (17), (19), les courbes ont la forme d'une Gaussienne.

La LDOS est pratiquement nulle dans l'intervalle $\Omega \in [0.00, 2.16]$, puis, elle commence à augmenter jusqu'à atteindre un max, à la fréquence $\Omega = 5.88$ et diminue jusqu'à ce qu'elle s'annule à $\Omega = 6.46$, où il apparaît un pic de type Fano, pour le cas de adoucissement des interactions magnétiques.

De plus, la LDOS est pratiquement nulle dans l'intervalle $\Omega \in [0.00, 5.52]$, à l'exception des sites (1), (11), (10), (20), où nous observons l'apparition d'un pic brusque avec les mêmes caractéristiques des oscillations de Fabry-Pérot, pour les trois cas (A-H-D) de couplage d'échange.

Le même comportement de la LDOS, à basse et à haute fréquences, dans le cas de $S = 1$, sauf qu'il y'a moins de fluctuations, l'augmentation du spin a permis à la densité de se stabiliser.

- Lacunes au centre

Sur la figure (4.2.3), les courbes de LDOS présentent des oscillations de type Fabry-pérot. Nous constatons que la densité devient très perturbée est son intensité est plus faible pour les sites positionnés près des lacunes. Des résonances de type Fano sont enregistrées aux fréquences $\Omega = 1.26, 3.02, 3.88, 6.86$.

Quand nous augmentons l'intensité des spins (S passe de 0.9 à 1.0), nous observons un décalage des LDOS légèrement vers la droite $\Omega = 1.34, 3.14, 4.10, 7.18$.

De même, ces valeurs glissent plus à droite, $\Omega = 1.40, 3.30, 4.32, 7.56$, quand nous passons de $S = 1.0$ à $S = 1.1$.

- Lacunes aux extrémités

Les courbes, de la figure (4.2.4), présentent aussi des oscillations de type Fabry-Pérot et des pics de type Fano qui se déplacent vers la droite quand nous augmentons l'intensité du spin S . Exemple, pour le cas où $S = 0.9$, les pics sont situés aux fréquences : $\Omega = 1.98, 3.80, 7.72$, et se décalent aux positions : $\Omega = 2.00, 3.88, 7.88$, pour $S = 1$ et aux positions : $\Omega = 2.60, 4.08, 8.30$, pour $S = 1.1$.

Nous concluons alors, l'augmentation de l'intensité du spin S nous permet d'élargir la bande passante des magnons dans les assemblages ferromagnétiques sous étude.

Les densités des sites situés au voisinage des lacunes sont plus intenses et très perturbées et les trois situations adoucissement, homogénéité et durcissement se distinguent mieux par rapport aux sites qui sont plus loin.

Sur les courbes LDOS, les fluctuations ayant la forme de Fabry-Pérot sont dues aux brisures de symétries provoquées par les lacunes (existence de réflexions multiples).

IV.2) Cas des phonons

Les courbes des LDOS magnoniques, des quatre inhomogénéités étudiées dans cette thèse, sont représentées sur les figures (4.2.1), (4.2.2), (4.2.3) et (4.2.4).

- Défaut de cisaillement à (45°) et (30°)

L'allure des courbes des figures (4.2.1), (4.2.2), pour les trois cas (a, b, c), en générale, présentent des oscillations de forme Fabry-Pérot avec des résonances de type Fano, sur les spectres de tous les sites. Par contre, l'intensité de la densité des spectres LDOS augmente quand nous passons de l'adoucissement au durcissement des constantes de forces dans les zones perturbées.

Le but de ce procédé numérique est d'examiner comment la dynamique vibrationnelle locale répond aux changements locaux dans l'environnement élastique (adoucissement, homogénéité, durcissement des contraintes) et de la masse atomique des sites (masse légère, masses semblables, masse lourde).

Les possibilités considérées sont semblables aux situations où les changements peuvent intervenir à proximité des marches et des replis dans les surfaces des structures à plusieurs atomes.

Pour les sites numérotés (6), (7), (8), (9), le spectre des LDOS est pratiquement nul dans le cas de l'adoucissement, et devient important en passant au durcissement des constantes.

Dans le cas d'un angle de cisaillement à 30°, nous retrouvons la même allure que l'angle de cisaillement à 45°, avec des fluctuations beaucoup plus importantes et un spectre très riche. La remarque est valable sur pratiquement la totalité des sites atomiques. Egalement, nous constatons la présence de résonances de type Fano, sur tous les sites irréductibles.

Nous pouvons déduire que l'intensité de la densité est affectée par l'angle de cisaillement car elle est plus importante dans le cas de l'angle (30°) que de l'angle (45°). Ce résultats est prévisible du fait que le nombre de plus proches voisins des sites irréductibles, passe de six (dans cas de l'angle 45°) à sept dans le cas de l'angle $\alpha = 30^\circ$.

La variation de l'angle de cisaillement permet d'annuler certains spectres (diminuer l'amplitude de vibration), pour quelques sites atomiques. Par conséquent, nous pouvons dire pour filtrer/amplifier certaines fréquences de vibration, il suffit de changer l'angle de cisaillement.

- Lacunes au centre et aux extrémités

Pour le cas des lacunes au centre, les spectres des LDOS sont donnés sur la figure (4.2.3). Les trois cas (a, b, c) décrivent l'impact de la masse sur les LDOS, de la masse légère à la masse lourde, en passant par des masses comparables ($m < 1$, $m \approx 1$ et $m > 1$). Et dans chaque cas nous avons rapporté l'impact de la variation des constantes de force dans le domaine perturbé.

Les spectres montrent des pics et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence qui correspond bien à l'intervalle des fréquences de dispersion du film composite parfait, pour l'ensemble des valeurs de k et m .

Les observations du cas de cisaillement restent valables (oscillations de Fabry-Pérot et résonances de Fano) dans le cas des lacunes.

La variation des constantes de forces dans le domaine perturbé laisse une empreinte sur les courbes avec un décalage de spectres et la multiplication ou la diminution de l'intensité et du nombre d'oscillations.

Pour le cas des lacunes aux extrémités, les spectres LDOS sont tracés sur la figure (4.2.4). Nous notons une multitude de pics de résonances avec des formes variées, et d'amplitudes différentes, leur nombre, leur hauteur et leur largeur dépendent fortement des paramètres du système (k, m) dans la zone perturbée pour les différentes configurations de défauts.

Nous signalons aussi que l'augmentation de la précision des calculs fera apparaître d'autres pics de résonances.

Les atomes confinés présentent moins d'oscillations que les autres sites. Ceci s'explique par l'intensité des forces qui gênent leur mouvement de vibration.

V) Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié l'influence de la variation de l'intensité des spins et celle des intégrales d'échanges sur les densités d'états associées aux états processionnels des spins (les magnons) qui sont localisés dans les zones inhomogènes.

Nous avons, également, étudié les conséquences de la variation du rapport des masses et des constantes de forces sur les LDOS et les états vibrationnels des atomes.

Les résultats obtenus présentent des formes asymétriques typiques de Fano et de Fabry-Pérot. Par conséquent, nous pouvons dire que chaque inhomogénéité (ou simplement brisure de symétrie) laisse une empreinte caractéristique dans les courbes des densités locales. De plus, les spectres contiennent des informations sur la structure détaillée de chaque système.

Références du chapitre 4

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. 136, 864 (1964).
- [2] H. Schober and S. Rols, Collection SFN 10, 3-136 (2010).
- [3] H. Hamzeh, Doctorate Thesis, Université Paris Sud, France (2012).
- [4] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323, 198 (1995).
- [5] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995).
- [6] A. Virilouvet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, J. Phys. Condens, Matter, 8, 7589 (1996).
- [7] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [8] A. Khater, N. Auby and R.F. Wallis, Surf. Sci. 217, 563 (1989).
- [9] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323, 191 (1995).
- [10] Y. Pennec and A. Khater, Surf. Sci. Lett. 348, L82 (1995).
- [11] A. Virilouvet, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, J. Phys.: Cond. Matter 8, 7589 (1996).
- [12] V.B. Braginsky, S.E. Strigin and S.P. Vyatchanin, Phys. Lett. A 287, 331 (2001).
- [13] M. F. Limonov, Optic J. 13, 703 (2021).
- [14] D.T. McClure, W. Chang, C. M. Marcus, L. N. Pfeiffer and K. W. West, Phys. Rev. Lett. 108, 256804 (2012).
- [15] S. Hein, W. Koch and L. Nannen, J. Fluid Mechanics 664, 238 (2010).

Conclusion générale

Les multicouches composites ouvrent des voies d'applications intéressantes et prometteuses dans tous les domaines. Elles sont de plus en plus qualifiées de matériaux du futur. Leur intégration dans le domaine de l'électronique de spin a encouragé les travaux de recherche à explorer leurs nouvelles propriétés et à les étudier sous leurs différentes formes.

Un nouveau rebondissement touche, actuellement, la classe des cristaux phononiques avec l'apparition d'une nouvelle catégorie de milieux dotés de comportements physiques inhabituels. En effet, la composition et la configuration de ces structures leur confère la capacité de bloquer la propagation des ondes ayant des longueurs d'ondes largement supérieures à la périodicité de la structure. L'origine de cette manifestation réside dans le fait que la structure est dotée de résonateurs qui peuvent vibrer localement à de très basses fréquences. Le mécanisme moteur de ces comportements est ainsi appelé *résonance locale*. Le potentiel de ce mécanisme a attiré les chercheurs à transposer ces fondements théoriques à la conception de structures périodiques permettant de bloquer ou d'atténuer les ondes sismiques.

L'intérêt scientifique, porté aux matériaux composites, nous a motivé à développer deux approches théoriques. La première permettant le traitement des phénomènes de diffusion d'ondes de spins à travers les zones perturbées dans les matériaux périodiques à épaisseur finie. Dans la première approche, notre étude est basée sur un Hamiltonien d'Heisenberg et une méthode théorique dite la méthode de raccordement. Quant à la seconde approche, elle nous permet de déterminer les fréquences de vibration des phonons dans les systèmes sous étude. La théorie de raccordement reste un moyen efficace et fiable pour obtenir les propriétés dynamiques. Ceci a permis d'examiner les aspects fondamentaux qui régissent les comportements dynamiques.

Dans les multicouches composites parfaites, les résultats obtenus montrent que les ondes de spin sont fortement impactées par l'angle d'incidence, l'intensité des spins des monocouches qui constituent le film, par contre, la présence de l'anisotropie ne change pas l'allure des courbes de dispersion, mais elle fait décaler les modes vers les hautes énergies de $\Delta\Omega \approx 0.2$, pour une anisotropie d'illustration de l'ordre de 10% J . Ceci a transformé les modes optiques en modes acoustiques. Ce qui nous renseigne sur la capacité de l'anisotropie de surface à glisser les modes de magnons. De plus, les résultats démontrent qu'il y a une proportionnalité entre l'intensité du spin S et les énergies des branches de dispersion.

Parallèlement aux propriétés magnétiques, les résultats obtenus dans l'étude dynamique du réseau atomique des films composites parfaits donnent uniquement vingt modes de vibration

non nuls au lieu de trente dont trois modes sont acoustiques et les autres sont optiques. Les résultats montrent aussi un chevauchement dans certaines plages de fréquence de vibration. Ce qui signifie que les modes sont excités simultanément dans ces plages. Ceci constitue un filtre pour certains phonons à des fenêtres de fréquences bien précises.

Les résultats obtenus, dans le cas des multicouches perturbées, ont montré l'influence du rapport des masses et des constantes de forces sur les conductances phononiques.

Dans cette thèse, les calculs ont été menés en utilisant la méthode dite de raccordement. Cette dernière a permis de déterminer les coefficients de transmission/réflexion et les conductances à travers deux types de défauts, cisaillements et les lacunaires. Et pour chaque type, nous avons examiné deux configurations différentes. Pour le cisaillement, nous avons étudié deux angles 30° et 45° . Pour les lacunes, nous avons étudiés deux situations, lacunes au centre et lacunes aux extrémités.

Les résultats obtenus ont montré que les inhomogénéités jouent un rôle important dans la propagation des ondes. Dans le cas d'un angle de cisaillement à 45° , les transmittances sont importantes quelle que soit la fréquence d'excitation du film composite ; contrairement à l'angle de 30° , où nous avons constaté que pour des grandes fréquences, le cisaillement fait écran à ces ondes et ne les laisse pas passées.

Dans le cas du défaut lacunaire, (positions aux extrémités ou au centre du film composite), la dynamique des films est fortement influencée. Ceci est visible sur les spectres des coefficients de transmission/réflexion et les conductances.

En résumé, dans tous les cas d'inhomogénéités examinés, nous avons constaté que ces dernières laissent des empreintes caractéristiques sur les spectres et conduisent à l'apparition de plusieurs types de résonances et oscillations dans les différents spectres en fonction de l'énergie de diffusion. Ces oscillations sont provoquées par les interactions entre les états du continuum et les états localisés générés par les défauts.

Dans la partie relative à la dynamique des réseaux atomiques, les énergies des courbes des conductances phononiques sont très faible pour les ondes entrantes et ayant des fréquences coïncidant avec des bandes interdites. Elles sont appelées aussi bandes d'arrêt. Ces défauts entraînent une sélectivité en fréquence dans la transmission de l'onde, et il en résulte des bandes de transmission réduites, permettant la propagation des ondes à travers le film composite, et des bandes interdites, annulant complètement la propagation des ondes. Dans la pratique, les propriétés des bandes permises et interdites peuvent être employées dans les capteurs pour amplifier ou filtrer certains phonons dans des intervalles bien précis. Ce qui assure le contrôle des vibrations dans les films minces d'une façon générale.

Pour l'évaluation des densités d'états locales (LDOS) des systèmes étudiés, un algorithme numérique, basé sur la méthode de raccordement et les fonctions de Green, a été conçu. Les résultats obtenus ont montré la présence de plusieurs pics et oscillations dans les spectres magnoniques et la phononiques. Ces résonances sont dues aux interactions entre les états propageant du film composite parfait et les états localisés générés par les défauts. Le nombre d'états localisés dépend de la géométrie du défaut et leurs énergies dépendent des paramètres physiques qui décrivent les zones perturbées (intégrale d'échange, intensité des spins, masses atomiques, constantes de forces, ...).

A travers ce travail de thèse, nous avons montré que chaque défaut laisse une empreinte particulière dans les courbes de diffusion (transmissions et conductances) et celles des densités d'états locales. L'apparition ou l'annulation d'une résonance sur les courbes dépendent du type de défaut. L'existence des inhomogénéités peut faire écran à certaines ondes dans certains intervalles d'énergie. Par conséquent, il est possible de les utiliser comme filtres en électronique. Dans le cas des phonons cette propriété peut être exploitée pour bloquer les ondes sismiques.

Ce travail ouvre d'intéressantes perspectives à exploiter. Nous citons parmi-elles :

- Etendre les calculs pour déterminer le transport thermique par phonons et le transport de chaleur par magnons dans les films composites contenant des dislocations et des lacunes et comprendre les échanges thermiques dans ce type de matériaux.
- Dans le deuxième cas, nous envisageons d'étudier l'influence d'autres types de défauts, dans les films minces composites, sur les phénomènes de diffusion magnonique et phononique.
- Dans le troisième cas, nous projetons d'examiner l'effet de l'épaisseur du film ainsi que le nombre et la nature des monocouches, qui constituent les multicouches composites, sur la dynamique des films.

Résumé

Afin de comprendre les mécanismes qui gouvernent la dynamique vibrationnelle et le mouvement de précession des spins à l'échelle nanométrique dans les films minces de type composites, en présence des impuretés et inhomogénéités structurales, nous nous proposons de modéliser certains dispositifs à multicouches à épaisseur finie et de déterminer leurs spectres phononique et magnonique. Les systèmes modèles sous étude sont constitués d'une dizaine de plans atomiques, obtenus par alternance de deux plans A et B ayant des sites atomiques différents.

La dynamique du réseau et le mouvement de précession des spins dans les films composites considérés, qui sont les excitations élémentaires se propageant collectivement sur les nœuds du réseau par l'empilement des deux plans atomiques, en présence d'inhomogénéités atomiques et structurales, font l'objet de notre étude, à basse température et en employant la méthode de raccordement.

Les spectres énergétiques de transmission et de rétrodiffusion cohérents de phonons et de magnons sont calculés comme éléments d'une matrice de diffusion de type Landauer par analogie avec le transport électronique. Les densités d'états de phonons et de magnons pour chaque système perturbé seront présentées et analysées. Les propriétés dynamiques sont déterminées en fonction des intensités des spins et les constantes de forces qui caractérisent les zones perturbées.

Les interactions entre les états localisés d'énergie et les modes du continuum font apparaître dans les spectres dynamiques plusieurs oscillations, certaines d'entre elles sont de type Fano.

Mots-clés : Films minces composites, Méthode de raccordement, Spectres de transmission et réflexion, Transmittance phononique et magnonique

Abstract

In order to understand the mechanisms, which govern the vibrational dynamics and the movement of precession of the spins at the nanometric scale in the thin films of the composite type, in the presence of the impurities and structural inhomogeneities, we propose to model multilayer devices with finite thickness and we to determine their phononic and magnonic spectra.

The model systems under study consist of ten atomic layers, obtained by alternating two different monolayers A and B.

The dynamics of the lattice and the motion of precession of the spins in the composite films considered, which are the elementary excitations propagating collectively on the lattice by the stacking of the two atomic layers, in the presence of atomic and structural inhomogeneities, make the object of our study, at low temperature and using the matching method.

The coherent transmission and backscattering energy spectra of phonons and magnons are calculated as elements of a Landauer-type scattering matrix, by analogy with electron transport. The densities of states of phonons and magnons for each perturbed system are also presented and analyzed. The dynamic properties are determined as a function of the intensities of the spins and the force constants that characterizes the disturbed zones in the composite film.

The interactions between localized energy states and continuum modes show several oscillations in the dynamical spectra, some of them are identified as a Fano type.

Keywords: Thin composite films, Matching method, Transmission and reflection spectra, Phononic and magnonic transmittance