

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE : DES SCIENCES
DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE

THESE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE

OPTION : PHYSIQUE DES MATERIAUX

Présentée par :

Boualem BOURAHLA

Sujet :

Etude dynamique des nanocontacts

Soutenue le : **10 / 12 / 2007.**

Devant la commission d'examen composée de :

M. Omar Lamrous	Professeur (Université M. Mammeri)	Président
M. Antoine Khater	Professeur (Université du Maine, le Mans France)	Directeur de thèse
M. Roger Maynard	Professeur (Université de Grenoble, France)	Examineur
M. Hamid Bouzar	Professeur (Université M. Mammeri)	Examineur
M. Rachid Tigrine	Maître de Conférences (Université M. Mammeri)	Examineur

Remerciements

Le travail de la thèse présentée a été effectué au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie, et au Laboratoire de Physique de l'Etat Condensé (LPEC, de l'Université du Maine, France, sous la direction scientifique de Monsieur le professeur Antoine Khater (Université du Maine, Le Mans, France). Je tiens à le remercier vivement pour ses conseils, son soutien et ses précieuses orientations, cela tout le long de la formation doctorale, ce qui m'a permis de mener à terme ce travail.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le professeur O. Lamrous pour avoir accepté de présider ce jury de thèse. Merci également à Messieurs les professeurs R. Maynard et H. Bouzar, et au Dr R. Tigrine, de m'avoir fait l'honneur de contribuer à l'examen de ce travail en participant au jury.

Qu'il me soit permis de remercier l'ancien directeur du LPCQ, Monsieur le professeur M. Amarouche, et l'actuel directeur, Monsieur le professeur S. Bouarab, ainsi que l'ensemble des chercheurs membres de notre laboratoire LPCQ, pour leur encouragement tout le long de ma formation doctorale.

Je tiens à remercier également le directeur du Laboratoire de Physique de l'Etat Condensé (LPEC) de l'Université du Maine, Monsieur le professeur A. Bulou, pour l'accueil et les conditions du travail durant mes multiples séjours ces dernières années au LPEC. Je voudrais aussi remercier Madame Annie Charron et Madame Jeannette Lemoine au Laboratoire LPEC et au Département de Physique de l'Université du Maine, qui ont fourni un accueil très chaleureux et qui ont facilité mon insertion dans le Laboratoire à chaque séjour scientifique.

Mes plus grands remerciements vont naturellement à mes parents, ma femme, mon fils (Yanis) et ma grande famille, ainsi que les amis, qui m'ont toujours soutenu et encouragé en toutes circonstances.

B. Bourahla

TABLE DE MATIERE

Introduction	3
Chapitre I : Dynamique vibrationnelle et magnétique	
des systèmes de basse dimensionalité	
Introduction	6
I.1. Dynamique vibrationnelle des systemes intégrant des nanostructures	6
I.2. Methode théoriques pour la dynamique vibrationnelle des systemes intégrant des nanostructures.....	10
I.3. La méthode de raccordement pour des systemes intégrant des nanostructures	11
I.3.a. Principe de la méthode	12
I.3.b. Formulation du problème.....	12
I.3.c. Calcul des grandeurs physiques	14
Références	17
Chapitre II : Diffusion phononique par un nanocontact entre deux groupes semi-infinis de triple chaînes atomiques parallèles déposées sur un substrat	
A) Dynamique du guide d'ondes parfait	19
I) Les modes propageants.....	19
1) le système modèle	19
2) les équations de mouvement	20
3) les courbes de dispersion	24
II) Les vitesses de groupe.....	25
III) Les modes évanescents	26
B) Etude de la diffusion dans le système perturbé	27
1) description du modèle	27
2) matrice dynamique du systeme perturbé.....	27
3) matrice de raccordement	28
4) la diffusion des phonons via un nanocontact	30
4.I) nanocontact engendré par deux lacunes symétriques	32
4.II) nanocontact obtenu à partir de deux lacunes asymétriques	34
4.III) nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques	36
C) Conductance phononique	38
Références	44
Chapitre III : Etude du transport magnonique par des nanocontacts magnétiques dans une structure à trois couches de spins parallèles sur un substrat non magnétique	
III.1 Introduction	44
III.2 Dynamique des spins ferromagnétiques dans des systemes parfaits	44
a) équation de mouvement de précession.....	45
b) relation de dispersion	46
c) vitesse de groupe	47
III.3 Etude de la diffusion à travers un nanocontact magnétique.....	49
a) nanocontact engendré par deux lacunes symétriques.....	49
b) nanocontact engendré par deux lacunes asymétriques.....	50
c) nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques	51
III.4. Discussions	54
Références	59

Chapitre IV : Densités spectrales et densités d'états vibrationnelle et magnonique	60
IV.1. Densités spectrales et d'états.....	60
1.1. densité vibrationnelle	60
1.2. densité magnonique.....	62
IV.2. Résultats	62
a. phonons.....	62
b. magnons	68
IV.3. Interpretation.....	70
Références	75
 Chapitre V : Dynamique d'une interface pointe AFM-surface	 76
V.1. Introduction	76
V.2. Définition d'AFM.....	77
V.3. Geometrie du nanocontact.....	79
V.4. Propriétés vibrationnelles	80
a) Dynamique des systèmes parfaits	80
b) Diffusion via l'interface.....	81
c) Conductance des phonons	92
Références	100
 Conclusion générale	 101
 Annexe I : Rappels sur les nanosciences	 103
Annexe II : Approximation harmonique-équations de mouvement	107
Annexe III : Calcul des vitesses de Groupe	110
Annexe IV : Forme explicite de quelques matrices des structures étudiées	111
Annexe V : Calcul des éléments de la matrice des fonctions de Green	114

INTRODUCTION

Une des tendances majeures en sciences et technologies contemporaines est la course à la miniaturisation. Plusieurs matériaux sont de plus en plus élaborés à l'échelle nanoscopique, avec l'objectif de les intégrer dans des dispositifs physiques mésoscopiques.

Dans ces dispositifs, les composantes matérielles présentent une surface rapportée à leur masse plus importante, au sens large, que dans des dispositifs classiques de plus grande taille. Ceci peut, en effet, influencer leurs propriétés physiques. D'autre part, des effets dits quantiques peuvent commencer à dominer le comportement de ces composantes à l'échelle du nanomètre et en modifier ainsi leurs propriétés physiques, telles que les propriétés électriques, magnétiques, optiques et autres.

Dans ces nouvelles nanostructures à basses dimensions, à géométries variables et complexes, les excitations élémentaires pourraient ainsi être soumises à un confinement et à un comportement quantique et cohérent.

L'élaboration matérielle de nanostructures se fait principalement par la technique « top-down », ce genre de technique consiste à produire de très petites structures par attaque chimique en partant de grands morceaux. Les nanostructures peuvent être obtenues aussi par des techniques « bottom-up » en manipulant et en déposant atome par atome, ou molécule par molécule, les matériaux dans une géométrie requise. Cette maîtrise de nouvelles techniques permet aujourd'hui l'obtention d'objets à l'échelle de nanomètre bien contrôlés.

La caractérisation et l'étude expérimentale de ces nanostructures se font par une gamme importante de techniques ; les microscopies à effet tunnel (STM) et à force atomique (AFM), représentent deux des techniques principales, par exemple. Le lecteur pourrait trouver une description de ces techniques dans l'Annexe I.

Dans cette thèse nous nous sommes intéressés en premier lieu aux effets cohérents et quantiques du transport des phonons et des magnons dans des systèmes à basses dimensions qui intègrent des nanostructures.

Historiquement la plupart des travaux dans ce domaine de transport cohérent ont été orientés vers l'étude des propriétés électroniques, dans des guides d'ondes contenant des nanostructures. Pour cela un des formalismes les plus privilégiés et utilisés a été celui de Landauer-Büttiker.

Cependant, les propriétés de transport cohérent de phonons et de magnons, dans des systèmes de basses dimensions et dans des guides d'ondes, contenant des nanostructures, sont moins étudiées sur les plans expérimental et théorique. Cela malgré leurs importances pour la compréhension de certains effets physiques, tels les échanges thermiques pour des dispositifs mésoscopiques et l'adsorption et la catalyse en surface. Néanmoins, un intérêt de plus en plus croissant a été accordé ces dernières années aux propriétés de phonons et de magnons dans des systèmes nanoscopiques.

Le travail présenté s'inscrit dans ce cadre de recherche. Notre contribution porte, en particulier, sur l'étude des propriétés de phonons et de magnons au voisinage des mancontacts atomiques ; ceci constitue le sujet principal de la thèse. Il s'agit de comprendre notamment le rôle et l'influence de la géométrie et la topologie d'un nanocontact atomique qui est inséré dans un système à basses dimensions, sur les propriétés vibrationnelles et magnétiques globales de ce système.

Même si nous restons dans le cadre des approximations linéaires, les résultats inédits obtenus fournissent une appréciation déterminante des effets physiques qui sont liés à la cohérence de ces excitations lors de leur propagation dans ces systèmes.

Le premier chapitre de la thèse est consacré à une description de la méthode utilisée pour l'étude de la dynamique des excitations élastiques (phonons) et des excitations magnétiques (magnons). Elle s'appuie principalement sur l'approche théorique de raccordement développée ces dernières années. Il existe, bien entendu, d'autres méthodes théoriques disponibles dans la littérature scientifique pour traiter les sujets d'étude, et nous faisons mention de certaines de ces méthodes dans ce chapitre.

Dans le deuxième chapitre nous calculons les propriétés vibrationnelles d'intérêt pour un guide d'ondes quasi-unidimensionnel, modélisé structurellement typiquement comme constitué de deux groupes de triples chaînes parallèles, les deux groupes joints par un nanocontact. Ce système est supposé libre des contraintes élastiques à ses surfaces. Même si dans la pratique un tel système est déposé sur un substrat, l'hypothèse est que le dépôt est exempt des interactions importantes avec le substrat. Le chapitre traite, en particulier, trois configurations topologiques différentes. La première est engendrée par deux lacunes symétriques, la seconde par deux lacunes successives asymétriques et dans la dernière nous étudions le cas d'un nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques. Le traitement des phonons de ces systèmes et des états vibrationnels localisés sur leurs nanocontacts, est mené dans le cadre de l'approximation harmonique (linéaire). Après la détermination des différents modes propres du système et des vitesses de groupe, nous calculons les sections efficaces de réflexion et de transmission dues à la diffusion de phonons de ces systèmes sur leurs nanocontacts. De plus, cette étude est effectuée pour trois possibilités d'environnement élastique pour le domaine de chaque nanocontact, à savoir : le cas d'adoucissement élastique, le cas d'une homogénéité élastique globale du système et enfin le cas de durcissement élastique. Notre objectif, en faisant varier cet environnement élastique et des contraintes au niveau du nanocontact, est d'accéder finement aux effets de nanomécanique sur le nanocontact par le biais d'une étude de ses propriétés vibrationnels et de ses états localisés. Cette étude nous permet enfin de calculer les conductances totales de phonons des systèmes d'intérêt, en comparaison avec la conductance des phonons dans chaque système idéal, libre de nanostructures insérées. Nos résultats sont ensuite discutés.

Au chapitre trois, nous nous intéressons aux problèmes de la propagation et de la diffusion de magnons pour des systèmes magnétiques, structurellement comparables aux systèmes

étudiés au chapitre précédent. Le nanocontact dans cette nouvelle problématique a pour rôle de joindre deux groupes de chaînes magnétiquement ordonnés et de moduler leurs propriétés de transport magnonique. Ainsi, nous traitons la dynamique de spins des systèmes magnétiques isolants. Chaque site est doté d'un spin orienté dans la direction d'ordre magnétique à basses températures et les spins sont liés par des échanges magnétiques. Un Hamiltonien du type Heisenberg décrit physiquement dans l'approche théorique l'état fondamental de l'ordre magnétique. De plus, le système est considéré comme reposant sur un substrat non magnétique, il est ainsi libre des interactions magnétiques. Les équations de mouvement de spins, décrites pour les sites des chaînes atomiques et du domaine du nanocontact, constituent le point de départ d'une analyse des propriétés de magnons et est en effet comparable à l'approche théorique adoptée pour les phonons au chapitre précédent. Nous utilisons l'approximation linéaire dans ces équations, où on néglige les interactions entre magnons, ce qui rend notre modèle valable à des températures plus basses que la température critique de Curie. Cette approximation n'est pas contraignante car il y a plusieurs systèmes magnétiques d'intérêt pour lesquels les températures de Curie dépassent largement la température ambiante. Trois configurations de nanocontacts sont analysées pour lesquels nous étudions la diffusion des magnons et ceci sous les mêmes objectifs d'adoucissement d'échange magnétique entre spin sur le domaine du nanocontact, d'une homogénéité globale d'échange du système et enfin le cas de durcissement de ces échanges magnétiques sur le domaine.

Si nous avons étudié dans les deux chapitres précédents les propriétés de transport des excitations élémentaires, notre but au quatrième chapitre est de calculer les densités spectrales locales des sites du domaine du nanocontact. Pour ce faire nous avons à calculer les fonctions de Green locales par la méthode de raccordement. Ceci nous a permis de calculer analytiquement et numériquement par la suite les densités spectrales et les densités d'états associées pour les états vibrationnels des atomes et les états de spins, qui constituent en effet la zone du nanocontact.

Au cinquième et dernier chapitre, nous avons voulu étudier en particulier les effets de diffusion de phonons pour un autre type de nanocontact dû à la jonction entre un guide d'ondes et une surface. Ce système pourrait être assimilé à l'interface entre une pointe AFM et la surface d'un matériau. L'objectif est de savoir comment les phonons du guide d'ondes sont diffusés via ce nanocontact et de calculer la conductance de la jonction.

La thèse présente enfin des conclusions générales et certaines perspectives offertes par notre approche dans ce domaine. Le lecteur trouvera également en annexes certains points discutés en détails.

Chapitre I

Dynamique vibrationnelle et magnétique des systèmes de basse dimensionnalité

Introduction

Dans un matériau les atomes d'un solide se placent en général sur un réseau cristallin. Ces atomes ne sont pas fixes mais effectuent des déplacements et des oscillations, en fonction de l'agitation thermique, autour de leur position d'équilibre [1].

L'ordre à longue portée dans ces solides permet à des oscillations locales de se propager comme des ondes élastiques au sein du système. Les énergies de ces ondes sont en général dispersives [2].

La propagation des ondes dans des systèmes de basses dimensions est fortement perturbée par l'existence de différents types d'inhomogénéités, ce qui conduit à des changements dans les propriétés physiques tels que : l'induction d'états localisés au voisinage de chaque défaut, modifiant ainsi la conductance du système [3-6].

Pour étudier les propriétés liées à la dynamique d'un système contenant des nanostructures, plusieurs techniques ont été développées, dont la diagonalisation directe, la méthode de fonctions de Green et la méthode de raccordement.

Dans ce chapitre, nous exposons les notions de base de la dynamique vibrationnelle dans les systèmes de basses dimensions [7-8], en décrivant les différentes techniques utilisées. Puis, nous abordons par la suite, l'étude de la dynamique des nanostructures magnétiques.

I.1 Dynamique vibrationnelle des systèmes de basses dimensions intégrant des nanostructures

Considérations générales :

Considérons un système de N atomes d'un solide, ordonnés sur un réseau cristallin. Le solide peut alors être considéré comme une succession infinie de cellules élémentaire contenant un nombre irréductible de sites. Nous appliquons les conditions aux limites périodiques de Born et Von Karman pour analyser la dynamique vibrationnel du solide.

Soit : \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , les trois vecteurs formant une base pour décrire une cellule élémentaire, la position d'équilibre $\vec{X}(l)$ de l'atome se trouvant sur le site l de la cellule élémentaire s'écrit alors :

$$\vec{X}(l) = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c} \dots\dots\dots(1. 1)$$

l_1 , l_2 et l_3 sont des entiers naturels. Puisque les atomes sous l'influence des fluctuations thermiques ne restent pas sur une position fixe, nous désignerons par $\vec{u}(l,t)$, les déplacements induits par l'agitation thermique de l'atome l par rapport à sa position d'équilibre, et le temps par la variable t .

L'équation de mouvement d'un atome du site l est gouvernée par une équation dynamique de type Newton :

$$m_l \frac{d^2 \vec{u}(l,t)}{dt^2} = \sum_j \vec{F}_{jl} \dots\dots\dots(1. 2)$$

La somme est sur tous les atomes j du site l , qui interviennent par des liens élastiques. En admettant des forces centrales qui lient les sites atomiques pour établir l'ordre à longue portée du solide, nous pouvons établir une forme très réaliste et efficace pour décrire les forces dans les équations (1. 2), voir Annexe II pour des détails. Cette forme s'écrit ainsi comme suit :

$$m_l \frac{d^2 \vec{u}(l,t)}{dt^2} = - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) k(l,l') [\vec{u}_{\beta}(l,t) - \vec{u}_{\beta}(l',t)] \dots\dots\dots(1. 3)$$

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

Dans l'hypothèse des ondes qui traversent le solide à une fréquence ω et pour lesquelles $\vec{u}(l,t)$ représente l'amplitude locale de l'onde sur le site l , nous pouvons écrire cette amplitude comme $\vec{u}_{\alpha}(l,t) = \vec{u}_{\alpha}(l,\omega) \cdot \exp(j\vec{q} \cdot \vec{r}(l,l')) \dots\dots\dots(1. 4)$

Où $\bar{u}_\alpha(l, \omega, t)$ est l'amplitude vibrationnelle de l'atome l suivant la direction α .

A l'aide de l'équation (1. 4), on peut alors réécrire l'équation (1. 3) du mouvement de vibration de l'atome l [9].

$$\omega^2 m_l u_\alpha(l, \omega) = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left[\frac{r^\alpha r^\beta}{r^2} \right] k(l, l') [u^\beta(l', \omega) - u^\beta(l, \omega)] \dots \dots \dots (1. 5)$$

L'équation (1. 5) peut être écrite pour les N atomes contenus dans la cellule élémentaire et selon les trois directions cartésiennes. Nous sommes alors en présence d'un système de $(3N)$ équations de mouvements (il y a 3 degrés de liberté par site).

A l'aide de l'équation algébrique en ω^2 , on peut déterminer les différents modes de vibration du système qui sont caractérisés par les solutions ω_s , (avec $s = 1, 2, \dots, 3N$, telles que $\omega_s \geq 0$).

Le système établi à partir des équations de type (1. 5), peut alors se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega^2 I - D_v(\bar{q})] |u\rangle = 0 \dots \dots \dots (1. 6)$$

Où : $D_v(\bar{q})$ est la matrice dynamique de taille $(3N \times 3N)$, pour chaque donnée de \bar{q} , dépendent généralement des constantes de force entre les différents atomes (phonons).

I : est la matrice identité de même rang que la matrice D_v , et $|u\rangle$ le vecteur propre de déplacements.

La condition pour que ce système homogène (1. 6) ait des solutions non triviales est que le déterminant soit nul :

$$\det(\omega^2 I - D_v(\bar{q})) = 0 \dots \dots \dots (1. 7)$$

Considérations spécifiques :

Les ondes élastiques ou vibrationnelles des systèmes de basses dimensionnalités ont fait l'objet d'un intérêt théorique et expérimental croissant depuis la fin du 19^{ème} siècle. Les premières études remontent à 1887, lorsque Lord Rayleigh discuta de la présence d'ondes localisées pouvant se propager dans des directions parallèles à la surface pour les milieux isotropes et élastiques. Ces excitations ont été identifiées comme des ondes de surface car elles sont caractérisées par une décroissance exponentielle de leur amplitude depuis la surface vers le volume et par la relation de proportionnalité entre la fréquence et le vecteur d'onde. Jusqu'au milieu des années soixante les applications principales de ces ondes de surface étaient orientées vers l'étude des ondes sismiques se propageant dans la croûte terrestre.

La structure détermine directement certaines propriétés physiques du matériau : notamment la stabilité chimique, résistance mécanique. D'autres caractéristiques physiques, comme les propriétés thermiques, optiques, magnétiques et électroniques, dépendent du spectre de vibrations du matériau. Par exemple, le transport de la chaleur dans un matériau isolant (verre ou polymère entre autres) est régi par les vibrations acoustiques des atomes. L'absence de périodicité ne permet pas de calculer un spectre de phonons, comme on le fait dans un cristal.

Cependant, le formalisme précédent, basé sur les conditions aux limites de Born et Von Karman, ne s'applique pas. Car l'absence de la translation dans l'une des directions, ne permet pas l'application de théorème de Bloch. Autrement dit, la brisure de symétrie suivant une direction rend impossible la résolution des systèmes d'équations des mouvements vibratoires d'un solide semi infini. D'où la nécessité d'une méthode appropriée qui permet de limiter le nombre d'inconnues [10].

Quelles sont les méthodes employées pour décrire et expliquer ces propriétés dans les matériaux désordonnés ?

Parmi ces dernières on cite la méthode de diagonalisation directe, appelée aussi « slab méthode », la méthode des fonctions de Green et la méthode de raccordement.

C'est sur cette dernière que s'appuiera notre modélisation pour l'étude de la diffusion d'ondes via des nanocontacts (joints) atomiques. Elle abordée en détail en I.3.

I.2 Méthodes théoriques pour la dynamique vibrationnelle des systèmes de basses dimensions intégrant des nanostructures

Il y a plusieurs méthodes que nous pouvons utiliser pour traiter les problèmes de la dynamique vibrationnelle.

Méthode de diagonalisation directe (Slab method) : introduite dans sa formulation générale par Clark en 1965, sa première application à un système physique a été réalisée par Allen. Il s'est plus particulièrement intéressé aux modes de surface d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche absorbée [11].

Durant les vingt dernières années, cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour étudier la dynamique vibrationnelle et magnétique aussi bien pour des surfaces planes que pour des surfaces vicinales [12-17].

Le principe de la méthode consiste à limiter les systèmes étudiés à un nombre fini de plans atomiques dans une direction, z par exemple, avec une extension infinie dans les deux autres directions cartésiennes x et y . 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. Il reste alors à écrire les équations de mouvements des atomes et des spins appartenant à la cellule unitaire pour déduire la matrice dynamique.

La résolution numérique de la matrice dynamique détermine les vecteurs et les valeurs propres, ce qui permet ensuite de remonter aux propriétés des surfaces en donnant accès par exemple aux courbes de dispersion, aux densités spectrales, et aux vecteurs déplacements et autres.

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

La méthode des fonctions de Green : durant ces dernières années, cette méthode a été la plus utilisée pour l'étude de la dynamique des systèmes réels, avec quelques variantes dans le formalisme mathématique [18-31]. Elle a été appliquée pour la première fois à la physique de l'état solide par Slater [32].

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 D_p qui s'écrit sous la forme :

$$D_p = D_v + P \dots\dots\dots (1. 8)$$

Où : P représente la matrice de perturbation.

Soit $G(\omega^2)$ la matrice des fonctions de Green définie par :

$$G(\omega^2) = (\omega^2 I - D_v)^{-1} \dots\dots\dots (1. 9)$$

Son équivalent pour le système perturbé peut s'écrire :

$$G_p(\omega^2) = (\omega^2 I - (D_v + P))^{-1}$$

$$G_p(\omega^2) = [\omega^2 I - D_v(I - P/(\omega^2 I - D_v))]^{-1}$$

$$G_p(\omega^2) = [(\omega^2 I - D_v)(I - G(\omega^2)P)]^{-1}$$

D'où la relation matricielle:

$$G_p(\omega^2) = (I - G(\omega^2)P)^{-1} \cdot G(\omega^2) \dots\dots\dots (1. 10)$$

Les états vibrationnel du système perturbé sont alors donné par les pôles de la fonction $G_p(\omega^2)$ [33-35]. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration ou de précession.

Le calcul détaillé de la matrice peut être consulté à la référence [36].

I.3 La méthode de raccordement pour des systèmes de basses dimensions intégrant des nanostuctures

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchtwang lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi infini à trois dimensions [37]. Elle a été reprise en 1987 par Khater et Szeftel dans deux articles ; le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+c(2×2) [38-39].

Depuis, la méthode de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle et magnétique d'un certain nombre de systèmes physiques [40-42].

I.3.a. Principe de la méthode

La méthode est analytique, elle consiste à décrire le mouvement de vibration des atomes par un nombre fini d'équations [38, 15-17]. Son application exige que l'espace du solide (système) soit divisé en trois (03) zones. (Voir fig.1.1).

1) zone parfaite : zone loin du défaut (se trouvant hors de portée de tous les effets de défaut), elle est caractérisée par une périodicité et c'est-elle qui permet le tracé des courbes de dispersion.

2) zone de défaut (perturbée) : c'est la région qui renferme tout types de nanostructures, de défauts, et dans cette zone la périodicité est perturbée.

3) zone de raccordement : composée des atomes situés entre les régions parfaites et les atomes de la zone perturbée. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut avec les états de vibration évanescents de la zone parfaite.

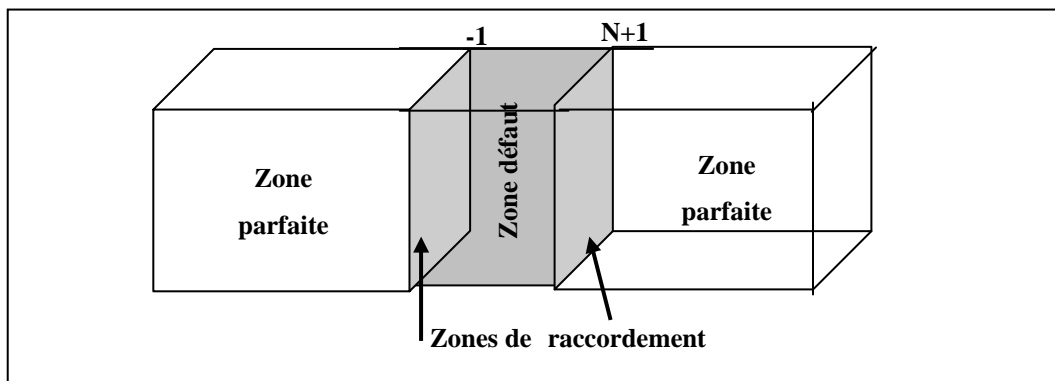


Fig.1.1 : Représentation schématique d'un solide perturbé.

I.3.b. Formulation du problème

Commençons par quelques définitions et conventions de notation qui nous permettront d’exprimer le problème sous forme mathématique. Tout d’abord, nous choisissons une fois pour toutes de considérer des ondes incidentes venants de la gauche vers la droite, et nous fixons l’origine du repère sur la position de la première colonne perturbée qu’on note (-1).

Le mode incident pourrait être une superposition des modes du guide d’ondes parfait. Nous écrivons pour un mode $i < 0$:

$$\bar{u}_i^i = (Z_{\bar{v}})^i \bar{u}_{\bar{v}} \dots\dots\dots (1. 11)$$

L’indice \bar{v} désignera toujours le mode incident.

En arrivant à la zone défaut, l’onde se sépare en deux parties : l’une transmise \bar{u}_t et l’autre réfléchie \bar{u}_r . Mais ces ondes sont plus complexes que l’onde incidente (les modes propres ayant des fréquences différentes ne se couplent pas dans un processus de diffusion).

Il faut donc développer les ondes transmise et réfléchie sur la base des modes propres :

$$\bar{u}_t^i = \sum_{\bar{v}} T_{\bar{v}}(Z_{\bar{v}})^i \bar{u}_{\bar{v}} \text{ pour } i \geq N+1 \dots\dots\dots (1. 12)$$

$$\bar{u}_r^i = \sum_{\bar{v}} R_{\bar{v}}(Z_{\bar{v}})^i \bar{u}_{\bar{v}} \text{ pour } i \leq -1 \dots\dots\dots (1. 13)$$

Les facteurs complexes R et T qui apparaissent ici forment, à une normalisation près, par le rapport des vitesses de groupe, la colonne \bar{v} de la matrice dynamique de diffusion du système perturbé.

Cette matrice (du système perturbé) D, trouve son origine dans l’écriture des équations de mouvements des atomes qui se trouvent entre les colonnes -1 et N+1 (atomes des zones défaut et de raccordements). La matrice correspondante est une matrice rectangulaire qui peut s’écrire sous la forme :

$$[D]|\mathbf{u}\rangle = [D] \begin{pmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |\text{rac}\rangle \end{pmatrix} = |\mathbf{0}\rangle \dots\dots\dots (1. 14)$$

Où le vecteur $|u\rangle$ représente les déplacements de tous les sites appartenant à la zone comprise entre les colonnes (-1) et $(N+1)$ de la figure (1.1). Il peut être décomposé en deux parties : la première $|irr\rangle$ constituée par les déplacements des sites irréductibles formant la région défaut, et la seconde $|racc\rangle$ formée par les déplacements associés aux sites raccordés (colonnes -1 et $N+1$).

La matrice de diffusion constitue la manière la plus commode d'exprimer les informations nécessaires pour décrire l'effet d'un défaut quelconque sur une onde entrante quelconque, puisqu'elle contient les facteurs de couplage entre tous les modes, à gauche comme à droite, pris deux à deux. A partir d'eux, on obtient les grandeurs physiques intéressantes.

I.3.c. Calcul des grandeurs physiques

Comme nous l'avons dit, les facteurs complexes R et T permettent de calculer toutes les grandeurs physiques intéressantes telles que les coefficients de transmission, de réflexion et la conductance des phonons.

1) Probabilités de transmission et de réflexion

On peut tirer, à partir des équations du mouvement, des informations facilement tels que les probabilités de réflexion et de transmission [43].

Si v est un mode propageant du guide d'ondes et \bar{v} le mode incident, les probabilités (appelés aussi coefficients) citées sont données respectivement par :

$$r_{\bar{v}v} = |\rho_{\bar{v}v}|^2 = \frac{v_v}{v_{\bar{v}}} |R_{\bar{v}v}|^2 \dots\dots\dots(1. 15)$$

$$t_{\bar{v}v} = |\tau_{\bar{v}v}|^2 = \frac{v_v}{v_{\bar{v}}} |T_{\bar{v}v}|^2 \dots\dots\dots(1. 16)$$

Les grandeurs τ et ρ sont les éléments de la matrice de diffusion du défaut.

Si v est un mode atténué, les coefficients t et r sont nuls. Il est en effet toujours possible de s'éloigner de l'échantillon jusqu'à ne plus ressentir l'effet de ce mode.

Comme dans tout processus de diffusion, la conservation du courant se traduit par l'unitarité de la matrice de diffusion. C'est elle qui impose la normalisation par le rapport des vitesses de groupe pour les éléments de cette matrice et pour les coefficients définis ici qui en sont dérivés. Dans ces

conditions, en supposant que l'onde incidente a une amplitude normalisée, la somme des coefficients r et t est aussi égale à 1 :

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\nu} + r_{\nu\nu}) = 1 \dots\dots\dots(1. 17)$$

2) La conductance phononique

Par analogie avec la conductance électronique qui est liée aux phénomènes de diffusion électroniques [44], il est utile de définir la conductance phononique et magnonique d'un défaut pour une fréquence Ω [42] donnée. Cette conductance notée $\sigma(\Omega)$ est définie par :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \nu'} t_{\nu\nu'} \dots\dots\dots (1. 18)$$

La somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence Ω .

Pour un guide d'ondes parfait, sans défaut, σ est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence Ω considérée.

La présence du défaut crée un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion. Cet écart donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion sur les nanostructures.

I.4 Dynamique de spins des matériaux magnétiques

Dans le cas des ondes de spin, le mouvement de précession d'un vecteur de spin \vec{S}_i , (situé sur un site atomique), est décrit par un Hamiltonien d'Heisenberg, décrivant toutes les interactions entre les spins. Il est donné par :

$$H = -2 \sum_{i, i'} J(i, i') \vec{S}_i \vec{S}_{i'} \dots\dots\dots(1. 19)$$

$J(i, i')$ représente un scalaire positif dans le cas d'un couplage ferromagnétique et négatif dans le cas antiferromagnétique. Il est appelé intégrale d'échange.

\vec{S}_l et $\vec{S}_{l'}$: sont les vecteurs de spins situés sur les sites l et l' du réseau magnétique. Ils dépendent des amplitudes de précession.

Grâce à la périodicité spatiale du réseau de spins, deux spins l et l' occupant deux sites équivalents du réseau effectuent à une phase près les mêmes mouvements de précession magnétique. Par conséquent, leurs amplitudes vérifient à chaque instant t , la relation suivante :

$$\bar{u}(l',\omega) = \bar{u}(l,\omega) \cdot \exp[\bar{q} \cdot \bar{r}(l,l')] \dots\dots\dots (1. 20)$$

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

La relation (1. 20) permet alors de réduire le système (1. 19) à un système de (N) équations homogènes à (N) inconnues pour les magnons (on écrit une équation par site).

Les équations peuvent être regroupées sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega I - D_v(\bar{q})]u \rangle = 0 \dots\dots\dots (1. 21)$$

Où : $D_v(\bar{q})$ est la matrice dynamique de taille $(N \times N)$, pour chaque donnée de \bar{q} , dont les éléments dépendent généralement des intégrales d'échange.

I : est la matrice identité de même rang que la matrice D_v et $|u \rangle$ le vecteur propre d'amplitudes de précession.

La condition pour que ce système homogène (1. 21) ait des solutions non triviales est que son déterminant soit nul :

$$\det(\omega I - D_v(\bar{q})) = 0 \dots\dots\dots (1. 22)$$

Les méthodes vues précédemment pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes de basses dimensions sont applicables aussi à l'étude de la dynamique des systèmes magnétiques. Par conséquent, les définitions, des coefficients de transmission et de réflexion ainsi que la conductance (dans ce cas est magnonique) du système, restent les mêmes.

Références : chapitre I

- [1] C. Kittel, *Introduction à la Physique de l'Etat Condensé*, Dunod édition (1995)
- [2] H. Poulet et J. P. Mathieu, *Spectre de Vibration et Symétrie des Cristaux*, Gordon & Beach : paris, Londres, New York, (1990).
- [3] B. A. Ivanov, V. M. Murayov and D. D. Sheka. J. Experimental and Theoretical Physics 89, 58 (1999)
- [4] M. Belhadi and A. Khater, Surf. Rev. and Letters 11, 99 (2004).
- [5] R. Lai, S. A. Kislév and A. J. Sievers, Phys. Rev. B 56, N° 9 (1997)
- [6] P. Bôni, B. Roessli, D. Gôrlitz and J. Kôtzler. Phys. Rev. B 65, 144434 (2002)
- [7] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss et I. Ipateva, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Supplement 3, Academic Press, New York and London (1971)
- [8] Thèse de doctorat d'état d'O. Rafil, Université du Maine, Décembre 1993
- [9] A. A. Maradudin, R. F. Walis, L. Dobrzynski, *Hand Book of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3, Garland, New York (1980)
- [10] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, ed. V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984)
- [11] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. De Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971)
- [12] J. E. Black and P. Bopp, Surf. Sci. 140, 275 (1984)
- [13] A. Lock, J. P. Toennies, G. Witte, J. Elec. Spec. & Related Phenomena, 54/55, 309 (1990)
- [14] P. Knipp, Phys. Rev. B 43, 6908 (1991)
- [14] P. Knipp, Phys. Rev. B 43, 6908 (1991)
- [15] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université de Tizi Ouzou (2001)
- [16] S. Irene, Mémoire de Magister, Université de Tizi ouzou (2001)
- [17] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater and M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Phys 37, 25 (2007)
- [18] L. Dobrzynski, Surf. Sci. Reports 6, 119 (1986)
- [19] L. Dobrzynski and D. L. Mills, J. Phys. Chem. Solids 30, 1043 (1969)
- [20] P. Masri, G. Allan, L. Dobrzynski, J. de Phys. 33, 85 (1972)
- [21] G. Armand, Phys. Rev. B 14, 2218 (1976)
- [22] G. Armand, J. de Phys. 38, 989 (1977)
- [23] G. Armand and P. Masri, Surf. Sci. 130, 89 (1983)
- [24] F. Garcia-Moliner, Ann. Phys. (Paris) 2, 179 (1977)
- [25] R. A. Allen, Surf. Sci. 76, 91 (1978)
- [26] G. Treglia and M. C. Desjonqueres, J. de Phys. 46, 987 (1985)
- [27] P. Knipp et B. M. Hall, Surf. Sci. 224, 983 (1989).
- [28] A. Kara, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu et F. Ercolessi, Phys. Rev. Lett. 72, 2223 (1994).
- [29] E. J. Mele et M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [30] A. Kara, S. Durukanoglu et T. Rahim, Phys. Rev. B 53, 15489 (1995).
- [31] J. C. Slater : Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol (M. C. Graw-Hill, New York, London, 1965).
- [32] A. A. Maradudin et J. Melangalis, Phys. Rev. A 133, 1118 (1967).
- [33] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323 (1995)
- [34] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341 (1995)
- [35] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, J. Phys. Condens. Matter, 8, 7589 (1996).
- [36] R. Tigrine, Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri, (2004).
- [37] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev., 155, 731 (1967)
- [38] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solid St. Phys. 20, 4725 (1987)
- [39] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addato et N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988)
- [40] A. Khater and W. Czaja, Physica B167, 33 (1990)
- [41] A. Khater, N. Auby, D. Kechrakos, J. Phys.: Condensed Matter 4, 3743 (1992)
- [42] A. Felly, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997)
- [43] A. Fellay, Rapport Master d'ingénieur physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996)
- [44] R. Landauer, J. Phys.: Condensed Matter 1, 8099 (1989)

Chapitre II

<p style="text-align: center;">Diffusion phononique par un nanocontact entre deux groupes semi-infinis de triple chaînes atomiques parallèles déposées sur un substrat.</p>
--

Durant ces dernières années, les effets de confinement ont été largement étudiés, dans les conducteurs et les semi-conducteurs, et utilisés pour obtenir de nouveaux effets physiques et réaliser de nouveaux dispositifs dans lesquels les propriétés des électrons et les photons sont fortement modifiées par la nanostructuration. L'extension de ces concepts aux cristaux phononiques, avec une échelle de longueur caractéristique de quelques nanomètres pour des énergies allant du GHz au Terahertz, a récemment fait objet de nombreux travaux à la fois dans les domaines théorique et expérimental et est actuellement en plein essor.

L'étude, la génération, la détection et la manipulation des phonons confinés a suscité de nouveaux développements instrumentaux, en particulier la spectroscopie dans le domaine temporel (picoseconde et femtoseconde), tout en continuant à s'appuyer sur des mesures dans le domaine spectral tel que la diffusion Raman. L'impact du confinement des phonons sur l'interaction électron-phonon ainsi que la modification des propriétés électroniques, magnétiques et vibrationnelles des nanostructures qui en découle sont également des domaines en plein développement, actuellement, par de nombreux laboratoires dans le monde.

Le but de ce chapitre est de contribuer à l'exploration de l'une des propriétés du nanomonde, à savoir la diffusion des ondes de vibration d'un réseau de basses dimensions, comportant des nanocontacts, en se basant sur le formalisme de Landauer et ses col [1-4], en fonction de l'onde excitée et des grandeurs physiques caractérisant le système. L'étude sera menée dans le cadre de l'approximation harmonique [5], des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins. Nous chercherons à savoir dans quelle mesure les phénomènes analogues à ceux observés pour le cas électronique se produisent dans le domaine phononique. La méthode de calcul utilisée est la méthode de raccordement [5-8], décrite au chapitre précédent, initialement introduite pour l'étude des phénomènes de localisation. Puis elle a été adaptée aux calculs des propriétés de transport cohérent dans les systèmes simples de basses dimensions en présence de nanostructures [9-20].

II.A. Le guide d'ondes parfait

II.A.I. Les modes propagateurs

2) A.I.1. Modèle

Nous considérons une triple chaînes d'atomes « classiques » parallèles, c'est-à-dire un assemblage de masses ponctuelles reliés par des ressorts, déposée sur un substrat. Les masses sont disposées sur un réseau infini, sur la figure (2.1), suivant la direction des x et de largeur 2a suivant la direction oy (a : est la distance interatomique).

Nous supposons que les interactions entre les atomes de la structure et les atomes du substrat sont négligeables devant les interactions entre atomes de la structure.

Nous nous plaçons dans une sorte d'approximation du plus proche et second voisin : seuls des atomes de colonnes immédiatement voisines sont reliés. Mais la simplification consistant à négliger les ressorts diagonaux est impossible, car la structure s'écrase sous l'effet du cisaillement. Nous tenons compte des ressorts obliques auxquels nous attribuons une constante de force k_2 . Les interactions entre premiers voisins étant k_1 . La distance entre deux atomes adjacents est a.

Les valeurs numériques de ces constantes sont arbitraires ; notre seul critère ayant été d'éviter des dégénérescences accidentelles. Pour simplifier les calculs, nous avons pris $a=1$.

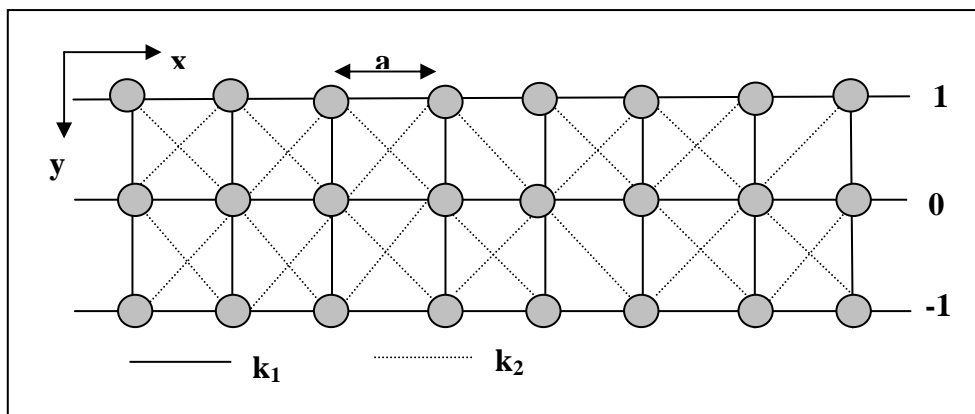


Fig.2.1 : Modèle du guide d'ondes à trois chaînes atomiques de pas égal à a.

II.A.I.2. Equations de mouvement

Notre objectif est de décrire le comportement du réseau hors d'équilibre. Dans ce cas, le mouvement de chaque atome est gouverné par une équation dynamique de Newton :

$$\sum \vec{F} = m \cdot \vec{\gamma} \dots\dots\dots(2. 1)$$

Les formes explicites de l'accélération et de la force sont données par :

$$\begin{cases} \vec{F} = -k\vec{x} \\ \vec{\gamma} = -\omega^2\vec{x} \end{cases} \dots\dots\dots(2. 2)$$

Où : ω est la fréquence propre d'oscillation, k est la constante de force.

Dans le cadre de l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales l'équation prendra la forme :

$$m_l \frac{d^2\vec{u}(l, t)}{dt^2} = -\sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} \cdot r_{\beta}}{r^2} \right) k(l, l') [\vec{u}_{\beta}(l, t) - \vec{u}_{\beta}(l', t)] \dots\dots\dots(2. 3)$$

Où : α et β représentent les directions cartésiennes, m_l la masse de l'atome l , $\vec{u}_{\alpha}(l, t)$ l'amplitude de sa vibration, r_{α} la composante cartésienne selon la direction α du vecteur $\vec{r}(l, l')$ joignant la position d'équilibre de l'atome l à l'atome l' , r est le module du vecteur $\vec{r}(l, l')$, et $k(l, l')$ la constante de force entre les atomes l et l' .

a) les équations du mouvement d'un atome (i,j) de la ligne (chaîne) notée (0)

** Suivant la direction (ox)*

$$-m\omega^2 u_x(i, j) = -(2k_1 + 2k_2)u_x(i, j) + k_1 u_x(i+1, j) + k_1 u_x(i-1, j) + \frac{k_2}{2} u_x(i+1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_x(i+1, j-1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1, j-1) + \frac{k_2}{2} u_y(i+1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_y(i-1, j-1) - \frac{k_2}{2} u_y(i-1, j+1) - \frac{k_2}{2} u_y(i+1, j-1) \dots\dots\dots(2. 4)$$

** Suivant la direction (oy)*

$$-m\omega^2 u_y(i, j) = -(2k_1 + 2k_2)u_y(i, j) + k_1 u_y(i+1, j) + k_1 u_y(i-1, j) + \frac{k_2}{2} u_y(i+1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_y(i+1, j-1) + \frac{k_2}{2} u_y(i-1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_y(i-1, j-1) + \frac{k_2}{2} u_x(i+1, j+1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1, j-1) - \frac{k_2}{2} u_x(i-1, j+1) - \frac{k_2}{2} u_x(i+1, j-1) \dots\dots\dots(2. 5)$$

L'excitation d'un mode propre de fréquence ω engendre des oscillations régulières données par une équation de la forme :

$$u_{\alpha}(l', \omega) = u_{\alpha}(l, \omega) \cdot \exp[j\vec{q} \cdot \vec{r}(l, l')] \dots\dots\dots(2. 6)$$

A t fixé, la dynamique des atomes de deux colonnes successives peut être atténuée. Il est commode de les relier par un facteur de phase Z .

Pour les modes propageants il est donné par : $Z = \exp(j\vec{q} \cdot \vec{r})$

Alors :

$$u_\alpha(i \mp 1, j) = Z^{\mp 1} u_\alpha(i, j) \dots \dots \dots (2. 7)$$

En tenant compte de la notation (2. 7), les équations (2. 4) et (2. 5) prendront la forme suivante :

Suivant la direction (ox)

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + k_1(Z + Z^{-1})]u_x(i, j) + \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j+1) + \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j-1) \\ + \frac{k_2}{2}(Z - Z^{-1})u_y(i, j+1) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_y(i, j-1) = 0 \end{cases} \dots \dots \dots (2. 8)$$

Suivant la direction (oy)

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]u_y(i, j) + [\frac{k_2}{2} + k_1](Z + Z^{-1})u_y(i, j+1) + [\frac{k_2}{2} + k_1](Z + Z^{-1})u_y(i, j-1) \\ + \frac{k_2}{2}(Z - Z^{-1})u_x(i, j+1) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j-1) = 0 \end{cases} \dots \dots \dots (2. 9)$$

De la même manière, on écrit les équations de mouvement des atomes $(i, j+1)$ et $(i, j-1)$.

b) les équations du mouvement de l'atome $(i, j+1)$ de la ligne (chaîne) notée (1)

Suivant la direction (ox)

$$\left\{ [m\omega^2 - 2k_1 - k_2 + k_1(Z + Z^{-1})]u_x(i, j+1) + \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_y(i, j) = 0 \dots \dots \dots (2. 10) \right.$$

Suivant la direction (oy)

$$\left\{ [m\omega^2 - k_1 - k_2]u_y(i, j+1) + [k_1 + \frac{k_2}{2}](Z + Z^{-1})u_y(i, j) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j) = 0 \dots \dots \dots (2. 11) \right.$$

c) les équations du mouvement de l'atome (i,j-1) de la ligne (chaîne) (-1)

Suivant la direction (ox)

$$\left\{ [m\omega^2 - 2k_1 - k_2 + k_1(Z + Z^{-1})]u_x(i, j-1) + \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_y(i, j) = 0 \dots\dots\dots(2. 12) \right.$$

Suivant la direction (oy)

$$\left\{ [m\omega^2 - k_1 - k_2]u_y(i, j-1) + [k_1 + \frac{k_2}{2}](Z + Z^{-1})u_y(i, j) - \frac{k_2}{2}(Z + Z^{-1})u_x(i, j) = 0 \dots\dots\dots(2. 13) \right.$$

Le mouvement des atomes de toute la structure sera déduit de celui des trois atomes (i,j), (i,j+1) et (i,j-1). On obtient alors un système contenant six équations avec autant d'inconnues, que l'on met sous la forme d'un problème aux valeurs propres :

$$[\Omega I - D_v(Z, r)]u = 0 \dots\dots\dots(2.14)$$

Où : $\Omega^2 = \frac{m\omega^2}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2$ est la fréquence normalisée, sans dimensions ; est le rapport entre les constantes de forces des deuxièmes et premiers voisins du réseau parfait ; D_v et I sont respectivement : la matrice dynamique (6x6) et la matrice identité.

$$D_v = \begin{bmatrix} m\omega^2 - 2r + Z + Z^{-1} & 0 & \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & -\frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & 0 & 0 \\ 0 & m\omega^2 - 1 - r & -\frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & 1 + \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & 0 & 0 \\ \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & \frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & m\omega^2 - 2 - 2r + Z + Z^{-1} & 0 & \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & -\frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) \\ \frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & 1 + \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & 0 & m\omega^2 - 2 - 2r & -\frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & 1 + \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) \\ 0 & 0 & \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & \frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & m\omega^2 - 2 - r + Z + Z^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r}{2}(Z - Z^{-1}) & 1 + \frac{r}{2}(Z + Z^{-1}) & 0 & m\omega^2 - 1 - r \end{bmatrix}$$

II.A.I.3. Courbes de dispersion

En résolvant l'équation (2. 14) pour Z fixé, nous obtenons les six (6) fréquences propres de vibrations Ω_v et les six vecteurs propres \vec{u}_v qui leur sont associés. Les courbes de dispersion correspondent aux solutions $|Z|=1$, sont données en fonction de $\varphi_x=q_x a=q_x$, lorsque q_x parcourt la première zone de Brillouin, soit ici $[-\pi, \pi]$, pour une valeur de $r=0.75$.

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 (figure (2.2)).

Les modes propres de vibration du réseau sont des ondes vectorielles. Il y a en effet deux degrés de liberté par site atomique (déplacement suivant ox et oy). Contrairement au cas électronique, où la grandeur variable (densité de charge) est scalaire. L'information contenue dans les courbes de dispersion n'est donc pas suffisante pour décrire complètement les modes ; il faut connaître aussi les vecteurs propres. Or ces derniers possèdent une propriété intéressante : ils sont soit symétriques soit antisymétriques par rapport à un axe parallèle à (ox) passant par le milieu du guide d'ondes (passant par la chaîne du milieu ligne (0)). Cette propriété des modes a une conséquence directe sur les relations de dispersions : deux branches de même symétrie ne se croisent jamais. Sur la figure suivante, les branches 2 et 4 sont symétriques et forment un anti-croisement.

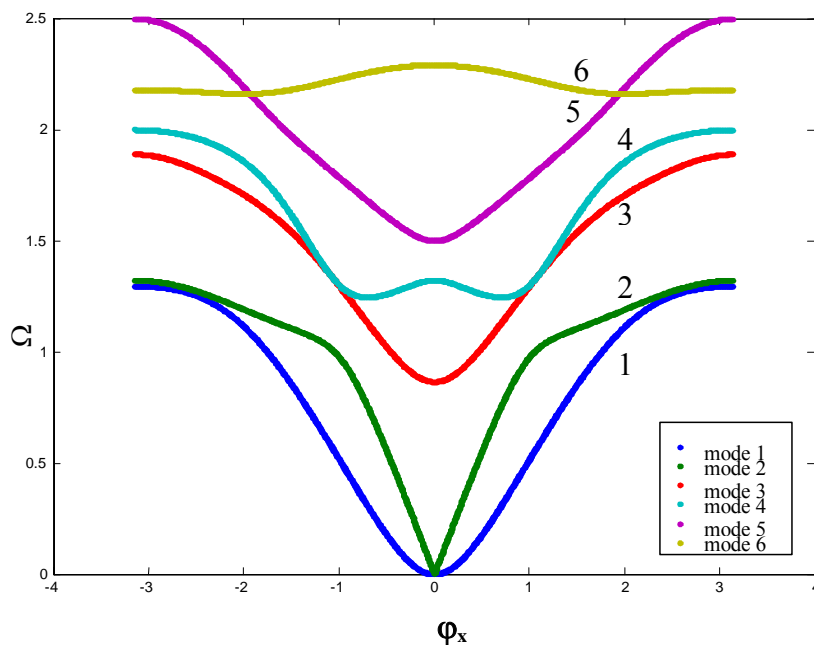


Fig.2.2 : Courbes de dispersion d'un guide d'ondes parfait d'une structure composée de trois chaînes d'atomes identiques et parallèles pour $r=0.75$.

Discussion des courbes

Nous remarquons immédiatement que les branches 1 et 2 sont acoustiques ($\Omega \rightarrow 0$ quand $\varphi_x \rightarrow 0$). Les quatre autres sont optiques.

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 important. 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.

La plage de propagation des modes (la numérotation se faisant de bas en haut) est plus importante pour les modes 1 et 2, puis elle diminue jusqu'à ce qu'elle devient faible pour le sixième mode :

mode 1 : [0-1.3] mode 2 : [0-1.35] mode 3 : [0.8-1.8]
mode 4 : [1.15-2.15] mode 5 : [1.5-2.45] mode 6 : [2.2-2.3].

Il existe des zones où certaines courbes ont une dérivée négative (modes 4 et 6), cette dernière a une interprétation physique simple : il s'agit de la vitesse de groupe de l'onde. 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 (3 chaînes) suivant la direction (oy). Cela fait penser à l'apparition de phonons mous à l'approche d'un changement de phase dans le cristal.

II.A.II. Calcul des vitesses de groupe

La vitesse de groupe d'une onde de vibration est par définition, la vitesse du paquet d'ondes : elle correspond à la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans le milieu. Elle est définie pour des valeurs d'ondes \vec{q} réelles par l'expression :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{soit} \quad \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \dots \dots \dots (2. 15)$$

Dans le cas où q est différent d'un réel, nous imposons $V_g=0$.

La forme matricielle de la dérivée est donnée par :

$$\left[\frac{\partial D_v}{\partial q} \right] = \begin{pmatrix} i(Z-Z^{-1}) & 0 & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & -i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & 0 & 0 \\ i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i(Z-Z^{-1}) & 0 & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & -i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) \\ i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & 0 & 0 & -i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) \\ 0 & 0 & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i(Z-Z^{-1}) & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{r}{2}(Z+Z^{-1}) & i\frac{r}{2}(Z-Z^{-1}) & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Pour déterminer cette vitesse, deux méthodes différentes peuvent être utilisées (méthode des différences finies ou la méthode perturbative). L'essentiel de ces méthodes peut être consulté dans les références [20]. (Un rappel est donné en annexe III).

Les deux méthodes citées exigent la résolution du problème du guide d'ondes parfait dans le sens :

$$D(\bar{q}, r)\bar{u}_v = -\Omega^2(\bar{q})\cdot\bar{u}_v \dots\dots\dots(2. 16)$$

Dans ce travail, nous avons opté pour la méthode perturbative qui consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation (2. 16) et l'équation de Schrödinger stationnaire $H\psi=E\psi$ portant sur les perturbations indépendante du temps en mécanique quantique.

L'allure de la vitesse de groupe V_g dans les six modes en fonction de la fréquence de diffusion Ω est donnée sur la fig.2.3.

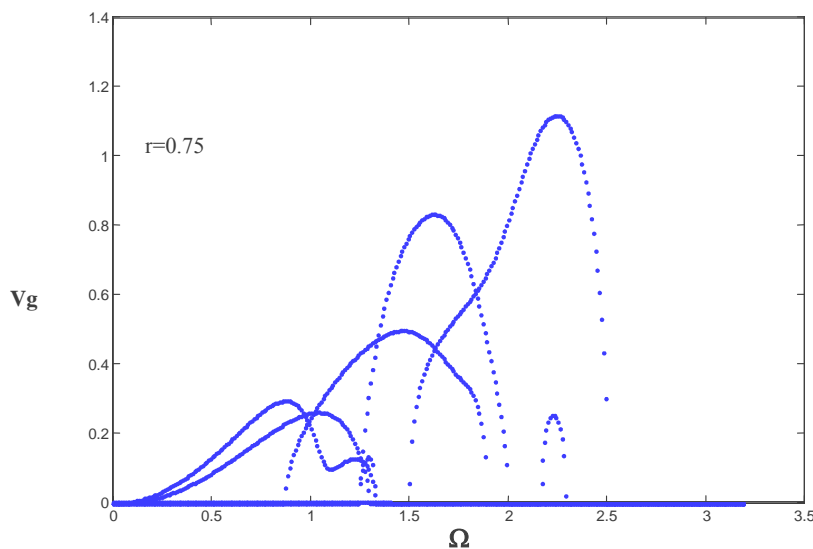


Fig. 2. 3 : Vitesses de groupe dans les différents modes (1 à 6) du guide d'ondes en fonction de Ω .

II.A.III. Les modes évanescents

Pour décrire le phénomène de diffusion en présence de différents types de nanostructures, 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. Par contre il faut écarter les solutions pour lesquelles $|Z|>1$, car elles donnent lieu à des modes divergents.

Calcul des facteurs de phase

On sait que les nanostructures, dans un système, couplent les différents modes à fréquence Ω constante ; il est donc indispensable de prendre celle-ci comme variable indépendante. Nous utilisons la méthode proposée par F. Gagel et col [20] dans nos calculs qui consiste à augmenter la base.

L'équation (2. 14) permet de trouver les fréquences Ω à Z (q_x) fixé.

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

$$\bar{v}_i = -\frac{1}{Z} \bar{u}_j \dots\dots\dots(2. 17)$$

$i \in [7, 12]$, pour $j \in [1, 6]$.

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

$$A(\Omega)\bar{w} = Z.B.\bar{w} \dots\dots\dots(2. 18)$$

$$\text{Avec : } \bar{w} = \begin{pmatrix} \bar{u}_j(l) \\ \bar{v}_i(l) \end{pmatrix} \dots\dots\dots(2. 19)$$

Notons que A et B sont des matrices de taille $(12 \otimes 12)$, extraites de la matrice dynamique $D_v(Z,r)$ après augmentation de la base. (Les formes des deux matrices sont données en annexe IV).

La résolution du système (2. 18) conduit pour chaque fréquence Ω , à six paires de valeurs propres $\{Z(i), Z^{-1}(i)\}$ et à six paires de vecteurs propres qu'il s'agit de trier.

II.B. Etude de la diffusion dans le système perturbé

II.B.1. Description du modèle

Le système modèle est divisé en trois zones : zones G et D (représentant le système parfait étudié en A) et la zone M correspondant au nanocontact (joint atomique entre les deux demi-systèmes). Notons que les constantes de forces dans la zone M peuvent être différentes de celles de la zone parfaite ; on les note respectivement k_{1d} et k_{2d} (1^{er} et 2nd voisins respectivement).

(Les rapports sont notés : $k_{1d}/k_1=r_{1d}$ et $k_{2d}/k_1=r_{2d}$).

Dans le système, il y a deux régions de raccordement qui sont définies par les sites atomiques séparant la zone M des zones G et D (voir les figures (2.4), (2.6) et (2.8)).

II.B.2. Matrice dynamique du système nanostructuré

La matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement des atomes de la zone du nanocontact (zone colorée) + celles des atomes de raccordement se trouvant aux frontières séparant les zones (M et D) et (M et G), on obtient une matrice rectangulaire D (appelée matrice dynamique du système perturbé).

La taille de la matrice dépend du nombre d'atomes dans la zone M, sachant qu'il y a deux (2) degrés de liberté par site. Alors il y a plus d'inconnues que d'équations. On peut l'écrire d'une façon générale comme $D(m,n)$.

$$\text{Dim}(D)=(m \otimes n) \dots \dots \dots (2.20)$$

Où : \mathbf{m} = le nombre d'atomes dans la zone nanocontact (dans la zone M + ceux de raccordement) fois deux. (il y a 2 degrés de liberté par site).

$\mathbf{n} = \mathbf{m} +$ (le nombre d'atomes qui sont reliés directement aux atomes de raccordement fois deux). (Il y a aussi 2 degrés de liberté par site).

II.B.3 Matrice de raccordement

Le rôle de cette matrice est d'établir les relations qui permettent de raccorder les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine du nanocontact et les champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits.

Pour cela nous allons représenter les déplacements atomiques par une combinaison linéaire des vecteurs $\{RT\}$ définissant un espace fini.

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

Les dimensions des vecteurs de bases définis sont liées au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de la zone parfaite, ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension six (06).

Pour un atome de la région de raccordement à droite, on peut écrire ses déplacements vibrationnels de la manière suivante [21-22] :

$$u'_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{j=1}^6 Z_j^{nx} A'(\alpha, j) T_j \dots\dots\dots(2. 21)$$

$$u_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{i=1}^6 Z_i^{nx} A(\alpha, j) R_i \dots\dots\dots(2. 22)$$

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

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 deux directions (ox) ou (oy).

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 déplacements atomiques de la zone nanocontact est noté $|u\rangle$. On peut le décomposer en deux parties :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \dots\dots\dots(2. 23)$$

* la partie $|irr\rangle$ est constituée des déplacements des sites irréductibles formants la zone M (le domaine nanocontact est coloré sur les schémas).

$\text{Dim}(|irr\rangle)$ = nombre d'atomes de la zone M fois 2 degrés de libertés par atome.

* la partie $|rac\rangle$ est composée des déplacements des deux zones de raccordements (gauche et droite).

$\text{Dim}(|\text{rac}\rangle) = [\text{nombre d'atomes de raccordement fois 2 degrés de libertés par atome}]$.

(Il faut compter les atomes à gauche et à droite)

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

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |\text{rac}\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [R] \cdot \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \dots\dots\dots(2. 24)$$

Où : I_d est une matrice identité. Sa taille dépend du nombre d'atomes dans le site irréductible multiplié par deux (2 degrés de libertés par site).

R_1, R_2, R_3 et R_4 : sont des sous matrices carrées, elles dépendent du nombre de modes propageants du système parfait, leurs dimensions (6x6). Ces dernières sont exprimées en fonctions des Z_i ($Z_1 \dots Z_6$) et des poids pondérés associés aux modes (cofacteurs).

R : est appelé matrice de raccordement, ses dimension sont ($n \otimes m$).

Le produit de la matrice D obtenue (en II.B.3) par la matrice R donne une matrice carrée $S(m \otimes m)$.

$$[D(m \otimes n)] \cdot [R(n \otimes m)] \cdot \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(m \otimes m)] \cdot \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \dots\dots\dots(2. 25)$$

Les états vibrationnels induits par l'existence des nanostructures seront déterminés par la relation de compatibilité :

$$\det([S(m \otimes m)]) = 0 \dots\dots\dots(2. 26)$$

II.B.4 La diffusion phononique via le nanocontact

Nous considérons le cas d'un mode propageant i ($|Z_i|=1$) qui se propage de gauche à droite, l'onde résultante diffusée par le nanocontact se décompose en deux parties : l'une transmise (se propage dans la partie D) et l'autre réfléchie (se propage dans le côté gauche G).

Cela donne naissance à un champ vibrationnel de déplacement dans les deux demis systèmes. Les déplacements atomiques dans une direction donnée à gauche du nanocontact peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de vibration du guide d'ondes parfait à la même fréquence :

$$u_{\alpha}(n_x, n_y) = A(\alpha, i) \cdot [Z(i)]^{n_x} + \sum_{i'=1}^6 [Z(i')]^{-n_x} \cdot R_{ii'} \cdot A(\alpha, i') \dots\dots\dots(2. 27)$$

Avec $n_x < 0$.

De la même façon, les déplacement atomiques à droite s'expriment par :

$$u'_{\alpha}(n_x, n_y) = \sum_{j=1}^6 [Z(j)]^{n_x} \cdot T_{ij} \cdot A'(\alpha, j) \dots\dots\dots(2. 28)$$

Avec $n_x > 0$.

$R_{ii'}$ 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 soin de les normaliser à l'aide des vitesses de groupe, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité de la somme des parties réfléchié et transmise.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} r_{ii'} = \frac{v_{i'}}{v_i} |R_{ii'}|^2 \rightarrow \text{réflexion} \\ t_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2 \rightarrow \text{transmission} \end{array} \right. \dots\dots\dots(2. 29)$$

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 G et D.

Nous examinons trois types de nanocontacts dans la structure parfaite de la figure (2.1).

II.B.4.I Nanocontact engendré par deux lacunes symétriques

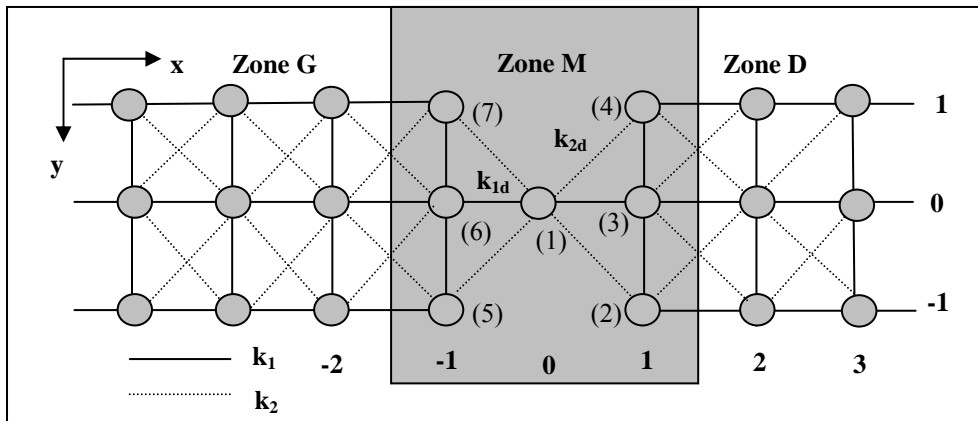


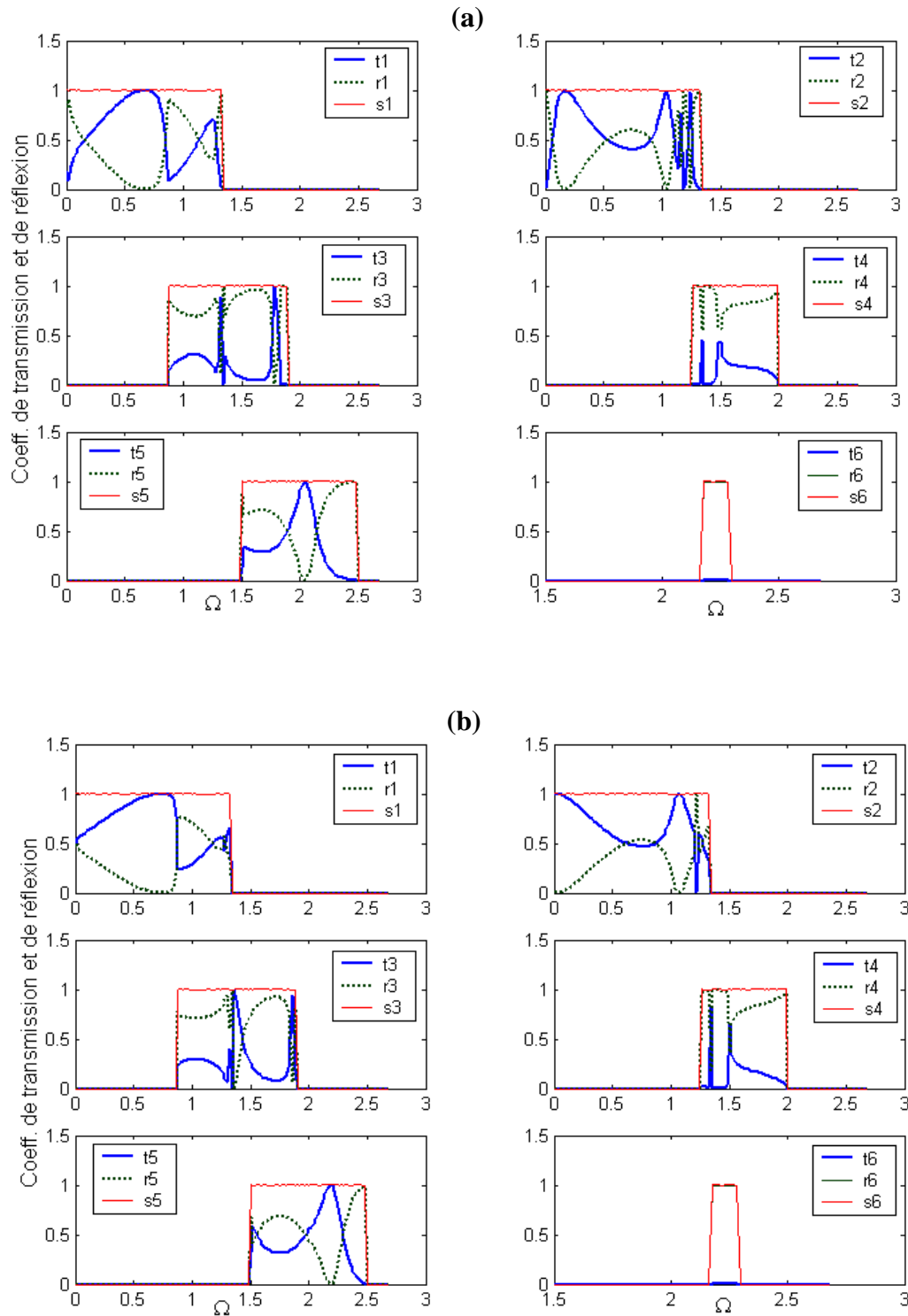
Fig.2.4 : Guide d'ondes perturbé ayant un défaut lacunaire symétrique dans une structure à triple chaînes parallèles.

La figure (2.4) représente le premier type de nanocontact. Il se compose de deux guides d'ondes parfaits (G et D) à trois chaînes atomiques parallèles, reliées par un nanocontact (zone M). Notre objectif est de savoir comment cette configuration influence-t-elle la propagation des modes propres du guide d'ondes ?

La réponse est donnée sur la figure (2.5) qui montre l'allure des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de l'énergie de diffusion Ω , dans les six modes de propagation. Notre travail s'appuie sur la méthode dite de raccordement, rappelée au chapitre I, de cette thèse. Nous avons considéré les trois possibilités des valeurs des constantes de forces dans le domaine de nanocontact :

- (a) $k_{1d} < k_1$ et $k_{2d} < k_2$ cas d'un adoucissement, ($k_{1d}/k_1=0.9$ et $k_{2d}/k_1=0.65$) ;
- (b) $k_{1d} = k_1$ et $k_{2d} = k_2$ cas d'une homogénéité, ($k_{1d}/k_1=1.0$ et $k_{2d}/k_1=0.75$) ;
- (c) $k_{1d} > k_1$ et $k_{2d} > k_2$ cas d'un durcissement, ($k_{1d}/k_1=1.1$ et $k_{2d}/k_1=0.85$).

Dans les parties II et III, nous changerons la forme du nanocontact et nous allons représenter les coefficients de transmission et de réflexion correspondant puis faire une comparaison entre les trois formes considérées.



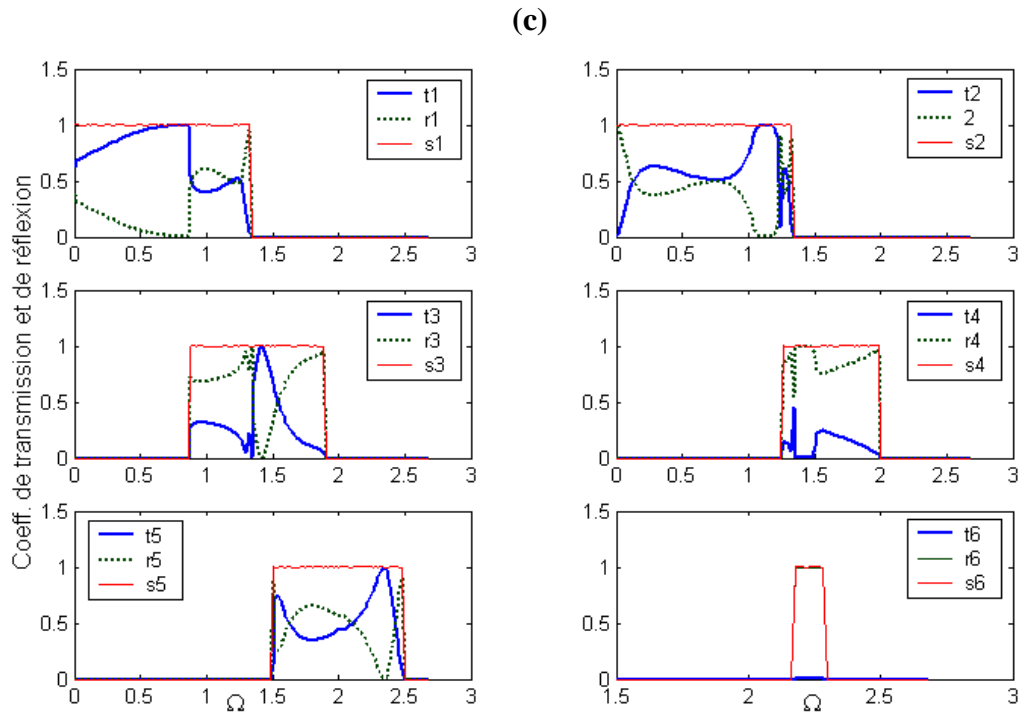


Fig.2.5 : Coefficients de transmission et de réflexion dans les modes 1 à 6 en fonction de Ω , dans le cas du nanocontact de la figure (2.4).
 (a) Adoucissement, (b) Homogénéité et (c) Durcissement des contraintes.

II.B.4.II Nanocontact engendré par deux lacunes successives asymétriques

Nous considérons le même nombre de lacunes formant le nanocontact (que précédemment) et nous étudions l'importance de la disposition de ces lacunes (ce qui donne naissance à un puits quantique de profondeur $2a$), (figure suivante).

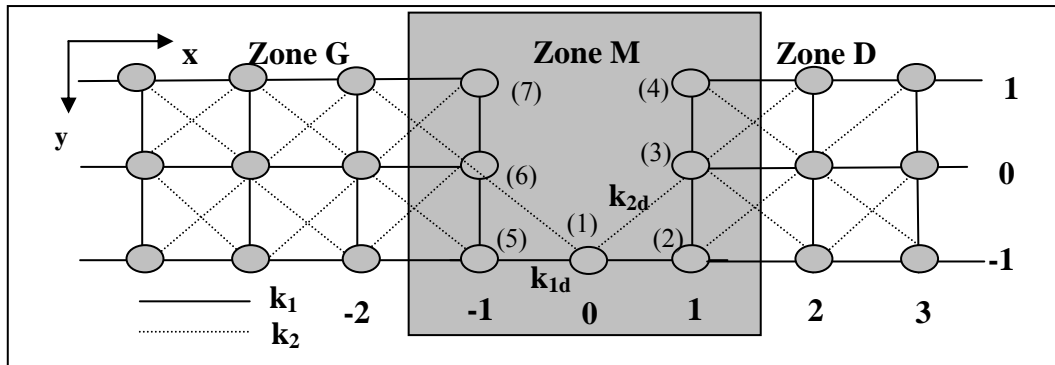
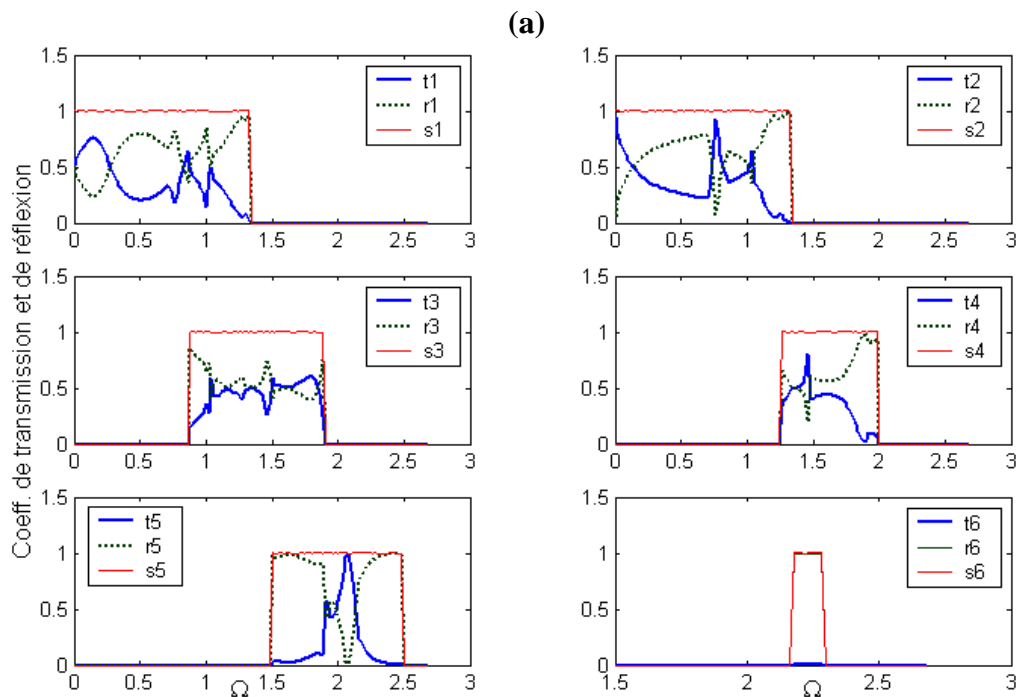


Fig.2.6 : Guide d'ondes ayant deux lacunes successives dans une structure à 3 chaîne parallèles.

Les courbes représentant les coefficients de transmission et de réflexion, de la structure en présence de la deuxième géométrie du nanocontact, de la fig.2.6, sont données par les figures ci-après, toujours dans les trois possibilités citées précédemment.



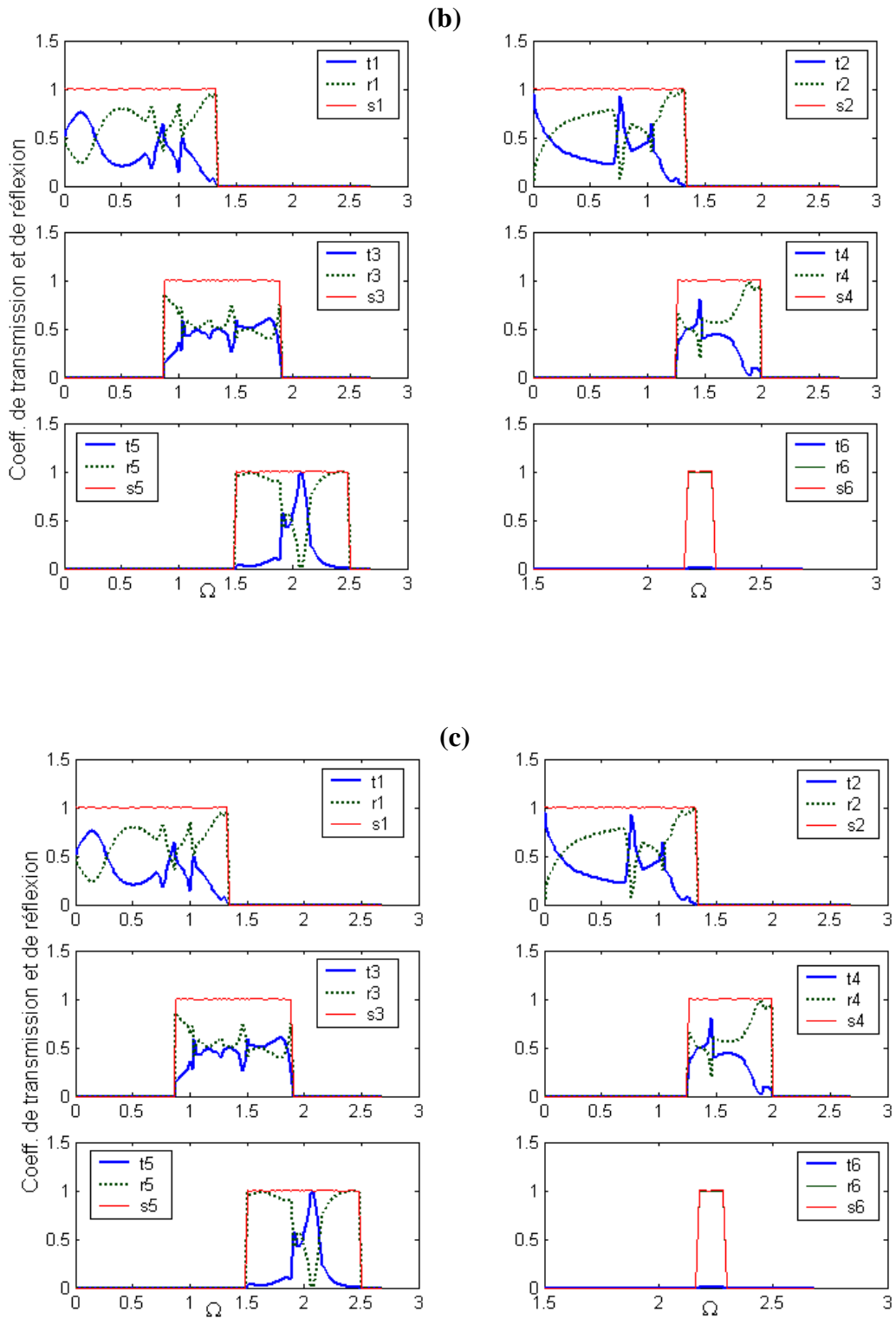


Fig.2.7 : Coefficients de transmission et de réflexion dans les modes 1 à 6, en fonction de Ω , pour les trois possibilités indiquées sur chaque figure. (a) Adoucissement, (b) Homogénéité et (c) Durcissement des contraintes.

II.B.4.III. Le 3ème type de nanocontact : système à quatre lacunes

Dans cette partie, nous augmentons le nombre de lacunes qui engendrent le nanocontact et nous enregistrons les phénomènes obtenus.

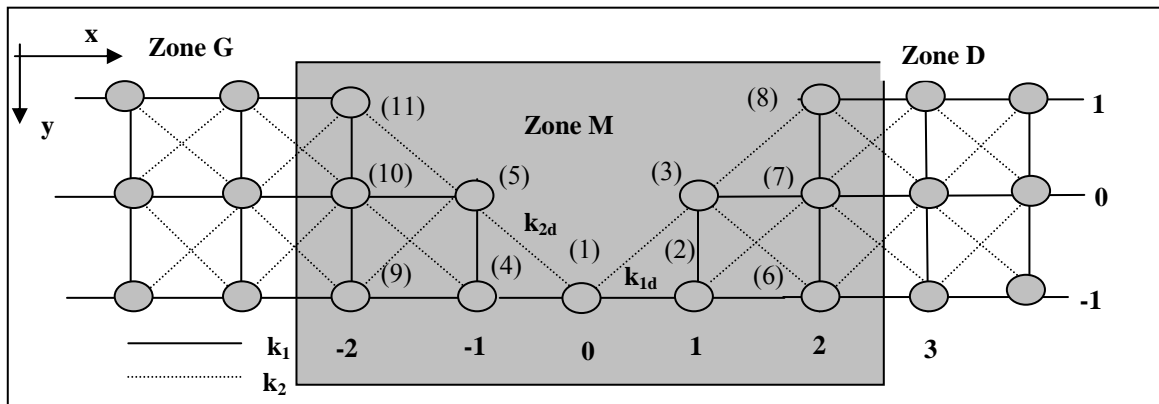
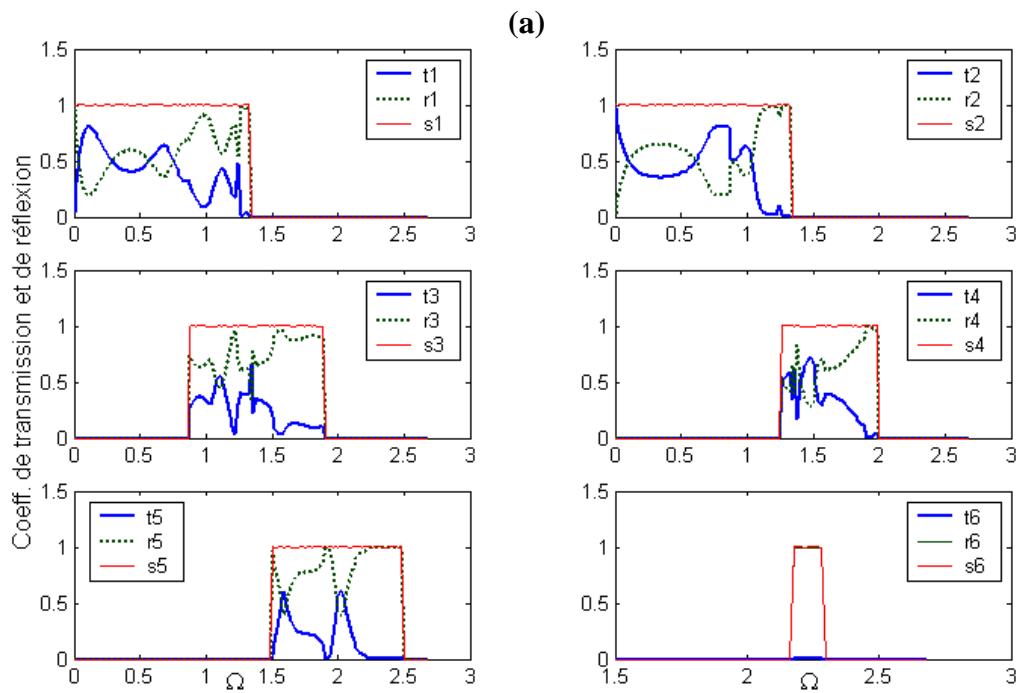


Fig.2.8 : Guide d'ondes perturbé ayant plusieurs lacunes asymétriques.



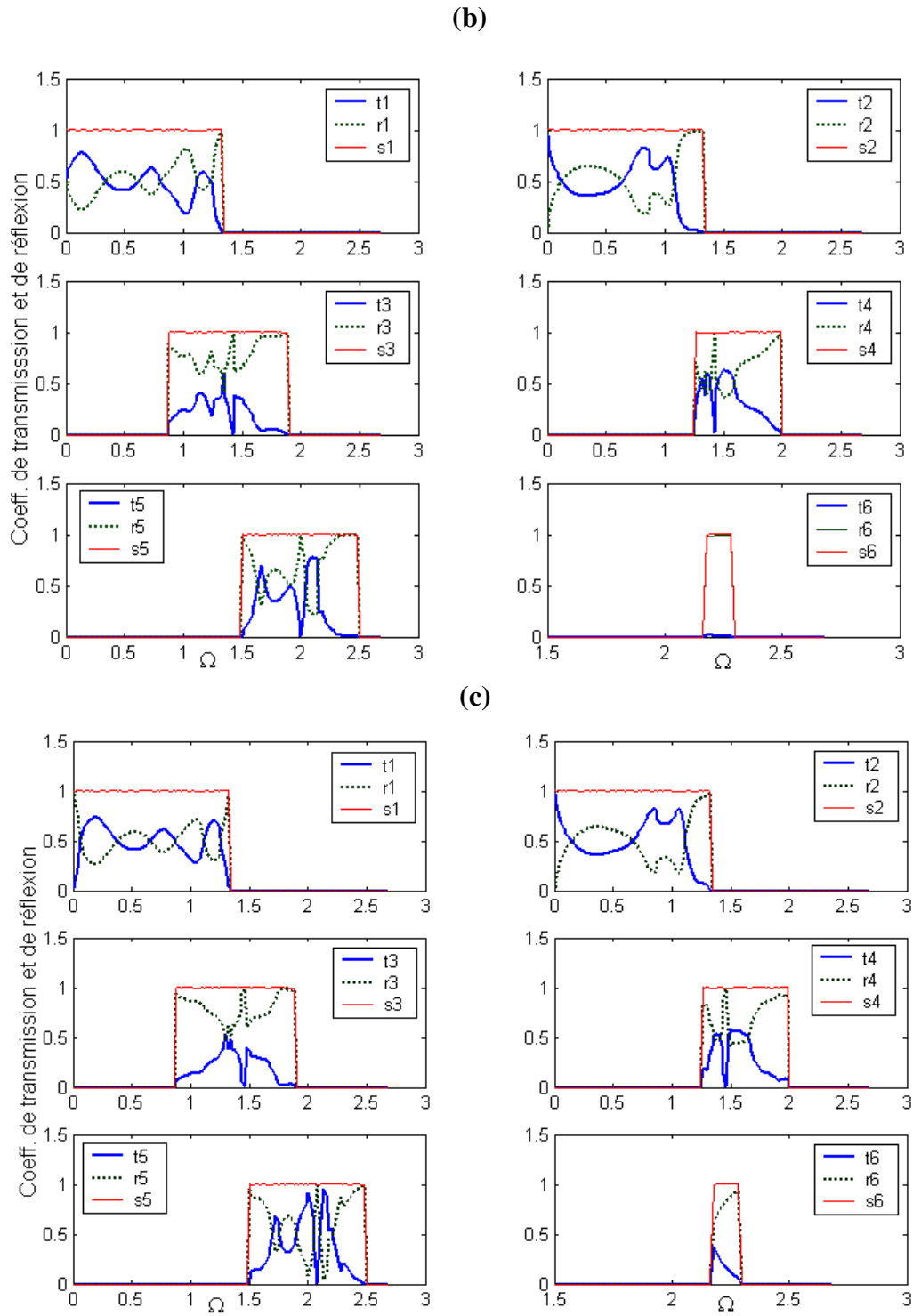


Fig.2.9 : Coefficients de transmission et de réflexion dans les modes 1 à 6 en fonction de Ω , d'un nanocontact formé par plusieurs lacunes. (a) Adoucissement (b) Egalité (c) Durcissement des contraintes.

II.C. Conductance phononique

L'allure de la conductance phononique des trois formes de nanocontacts des systèmes étudiés (deux lacunes symétriques, deux lacunes asymétriques et plusieurs lacunes asymétriques) est donnée sur la fig.2.10, pour les trois possibilités de l'environnement élastique, à savoir :

(a) adoucissement (b) homogénéité (c) durcissement des constantes de forces.

Nous avons représenté aussi la conductance du système idéal (sans les nanocontact), pour noter directement les différentes modifications induites par les formes géométriques de nanocontacts sur le phénomène de diffusion des phonons.

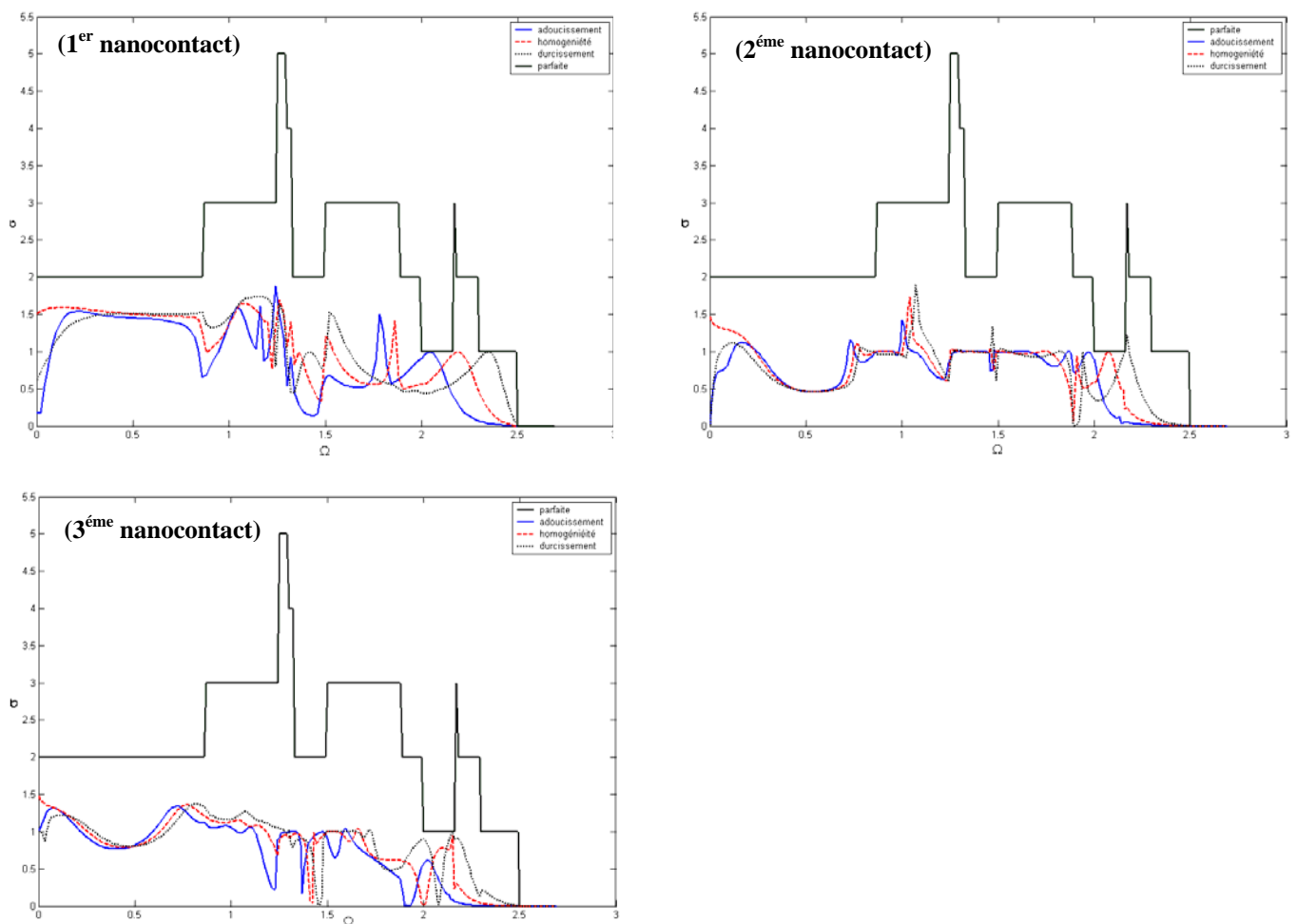


Fig.2.10 : Courbes de conductances phononiques.

Discussion des résultats

Les figures (2.5), (2.7) et (2.9) montrent l'allure des coefficients de transmission et de réflexion dans les six modes en fonction de l'énergie de diffusion Ω . Nous pouvons vérifier sur les figures de chaque mode que la somme vaut toujours un ($t_i+r_i=1$), avec $i=1, \dots, 6$.

Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine de propagation de la structure parfaite, là où les vitesses de groupe sont non nulles $\Omega \in [0 - 2.5]$.

Les résultats sont obtenus pour une onde incidente venant de la gauche se déplaçant vers la droite du domaine de nanocontact.

Les résultats numériques sont obtenus pour trois types de configurations de nanocontacts : le premier est engendré par l'existence de deux lacunes symétriques par rapport à la couche centrale, le deuxième est obtenu par la création de deux lacunes successives, puis le dernier est le produit de plusieurs lacunes asymétriques.

De plus, pour chaque configuration, nous avons tracé les coefficients de transmission et de réflexion dans trois possibilités de l'environnement atomique :

$$i) \quad k_{1d} < k_1 \text{ et } k_{2d} < k_2,$$

(Les constantes de force de la zone nanocontact sont inférieures à celles de la zone parfaite).

$$ii) \quad k_{1d} = k_1 \text{ et } k_{2d} = k_2,$$

(Les constantes de force sont identiques).

$$iii) \quad k_{1d} > k_1 \text{ et } k_{2d} > k_2.$$

(les constantes de force de la zone nanocontact sont supérieures à celles de la zone parfaite).

Dans les trois types de nanocontacts, la transmission dans les deux premiers modes symétriques (notés 1 et 2) qui sont aussi acoustiques s'annule uniquement vers la fin des modes et présente moins d'oscillations par rapport aux quatre autres modes asymétriques et optiques (3, 4, 5 et 6).

Ces oscillations sont identifiées comme étant des résonances de type Fano, elles sont dues aux interactions entre le continuum et les états résonants autour du nanocontact. Leur nombre est cependant plus élevé dans le troisième cas (nanocontact à plusieurs lacunes), ce qui traduit l'existence de plusieurs modes de vibration localisés de même symétrie. L'étude des déplacements des atomes, de la zone formant le nanocontact, aux fréquences de résonances

permettrait de caractériser chacun de ces modes, ou au moins d'identifier leurs comportements principaux.

On remarque aussi, sur les différentes figures que : pour un nanocontact donné parmi les trois envisagés dans ce chapitre, la réflexion est très sensible à la variation des valeurs des constantes de forces au niveau du domaine de nanocontact. On dénombre beaucoup de fluctuations avec l'augmentation (durcissement) des constantes élastiques.

Les courbes de transmission et de réflexion du premier type de nanocontact présentent moins d'oscillations et de fluctuations par rapport aux deux autres, ceci est due certainement à la position de l'atome du contact (joint) qui assure la liaison entre les deux systèmes semi infinis, car dans ce cas l'atome garde la totalité de ses deuxièmes voisins, contrairement à la deuxième configuration et idem pour la troisième configuration.

Dans le cas de l'adoucissement des contraintes, on remarque une diminution de la distance entre transmission et réflexion dans les six modes de vibration, et dans le cas du durcissement les deux coefficients s'éloignent l'un de l'autre et il y'a aussi l'apparition de nouveaux pics.

Sur les figures (2.10a, 2.10b et 2.10c), nous avons tracé, pour les trois configurations de nanocontacts et dans les trois possibilités de l'environnement élastique, l'allure des conductances des phonons, en fonction de l'énergie de diffusion Ω . Nous avons représenté aussi celle du guide d'ondes parfait sur la même courbe pour faire une comparaison et noter directement les différentes modifications induites par l'existence des nanostructures.

Pour le guide d'ondes parfait, $\sigma(\Omega)$ est un entier et donne le nombre de modes propageants à la fréquence considérée.

En effet, dans les intervalles de fréquences suivants : $[0 - 0.86]$, $[1.33 - 1.49]$, $[1.89 - 2.00]$ et $[2.18 - 2.30]$, il ne peut y avoir que l'excitation de deux modes au maximum.

Dans les intervalles $[0.86 - 1.24]$ et $[1.49 - 1.89]$, il y'a trois modes qui peuvent intervenir (excités) simultanément.

Dans l'intervalle $[1.24 - 1.3]$, on peut avoir un grand nombre de modes (cinq sur six).

En présence des lacunes qui engendrent les nanocontacts, l'écart entre $\sigma(\Omega)$ et sa valeur effective donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion élastique sur le domaine propre du nanocontact.

On remarque sur la courbe de conductance phononique des oscillations complexes. Elles sont dues aux multiples réflexions sur les bords de la zone nanocontact.

La conductance du nanocontact symétrique est plus grand par rapport aux deux autres, ceci s'explique par la position du joint qui filtre moins les ondes incidentes venant de la gauche comparativement aux deux nanocontacts asymétriques.

Les résultats prouvent que la conductance de différentes configurations est une fonction dépendante de l'énergie de diffusion de la structure. Au plus basses fréquences les conductances commencent par des valeurs maximales pour le deuxième et le troisième type de nanocontact sauf dans le cas homogène (cas symétrique commence par une grande valeur), et au fur et à mesure que Ω augmente, elles présentent des fluctuations et deviennent nulles à la limite de la zone de Brillouin.

Nous retrouvons également les pics de résonances respectifs exactement aux mêmes positions trouvées sur les figures des coefficients de transmission et de réflexion.

Le nombre de ces fluctuations (résonances de Fano) dépend fortement du nombre de lacunes. Ce qui explique le nombre plus élevé de pics dans le troisième cas. Notons aussi que ces derniers se déplacent vers les hautes fréquences avec le durcissement des constantes de force.

Dans l'intervalle de fréquence $[0 - 0.86]$, uniquement les modes acoustiques (1 et 2) qui peuvent exciter les systèmes, on observe peu (ou absence) d'oscillations dans toutes les configurations et dans l'ensemble des possibilités envisagées. Cette situation est due probablement à l'inexistence des effets d'interférences entre les autres modes optiques propageants et les états localisés du domaine de nanocontact, et aussi aux longueurs d'ondes relativement longues des modes 1 et 2 en comparaison avec le paramètre du réseau dans cet intervalle de fréquence.

Aux hautes fréquences, le premier type de nanocontact ne présente aucune résonance de Fano, contrairement aux deux autres configurations qui montrent un nombre d'oscillations important.

En conclusion, nous avons présenté un modèle simple pour l'étude de la diffusion d'ondes élastiques via des nanostructures géométriques formant des nanocontacts. Ces derniers sont considérés comme étant des joints atomiques insérés entre deux sous groupe de

trois chaînes atomique parallèles. Le système est supporté par substrat de nature différentes (pas d'interactions entre le dépôt et le substrat).

Les résultats numériques montrent que le spectre de conductance des différentes types de nanocontacts analysés, commencent par des valeurs maximales à basses fréquences et au fur et à mesure qu'on augmente la fréquence, les systèmes présentent des oscillations appelées résonances de Fano qui sont la signature de l'interaction et de couplage entre les modes propageants et les modes localisés du domaine de nanocontact. Notre objectif est de connaître l'influence de la géométrie de nanocontact sur les propriétés dynamiques et la conductance de phonons.

Références : chapitre II

- [1] R. Landauer, *Phylos.* 21,863 (1970)
- [2] R. Landauer, *Z. Phys.* B68, 217 (1987)
- [3] R. Landauer, *J. Phys.: Condensed Matter* 1, 8099 (1989)
- [4] C. Berthod, F. Gagel and K. Maschke, *Phys.Rev.*B50, 18299 (1994)
- [5] Thèse de doctorat d'état de O. Rafil, Université du Maine (1993)
- [6] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 20, 4725 (1987)
- [7] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addato et N. Auby, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 21, 2113 (1988)
- [8] M. Belhadi, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy and R. Tigrine *Phys Stat Sol. (b)* 228, 685 (2001)
- [9] A. Khater, J. Hardy, M. Belhadi, O.Rafil, R.Tigrine and K.Maschke
Deuxième Colloque Franco-Libanais sur les Sciences des Métaux (CSM2), (2000)
- [10] M. Belhadi, Thèse de doctorat d'état, Université de T. Ouzou (novembre 2000)
- [11] H. Boumrar, mémoire de Magister, Université de T. Ouzou (2003)
- [12] M. S. Rabia, mémoire de Magister, Université de T. Ouzou (2000)
- [13] S. Amoudache, mémoire de Magister, Université USTHB (Alger), (2005)
- [14] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A. Virlovet and K. Maschke, *Eur. Phys. J. B***15**, 435 (2000)
- [15] M. Belhadi, A. Khater, J. Hardy and K. Maschke, *Eur. Phys. J. App* **35**, 185 (2006)
- [16] M. Belhadi, A. Khater, *Surf. Rev. and Letters* Vol. 11, 1 (2004) 99-109
- [17] R. Tigrine, A. Khater, M. Belhadi and O. Rafil, *Surf. Sci.*580 (2005) 1-10
- [18] M. Belhadi, A. Khater and K. Maschke, *Surf Rev. and Letters*, vol. 11, No 1 (2004) 87-97
- [19] R. Tigrine, A. Khater, O. rafil, M. belhadi and J. Hardy, *phys. stat. sol. (b)* **239**,No.1, 144-151 (2003)
- [20] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, *Modern physics LettersB*, Vol. 19, Nos 13 & 14 (2005) 625-635
- [21] F. Gagel and K. Maschke, *phys. Rev.*, **B 52**, 2013 (1995)
- [22] A. Fellay, Travail d'ingénieur Physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996)

Chapitre III

Etude du transport magnonique par un nanocontact créé dans une structure à trois chaînes de spins ferromagnétiques.

III.1. Introduction

Des études ont été menées, par analogie, avec les vibrations cristallines [1], pour comprendre le comportement des excitations magnétiques [2-4] dans des structures de basses dimensions en présence des inhomogénéités de structure.

Organisé en réseau, le nanoobjet ou le nanomatériau aimanté augmente la puissance de mémoires devenues en outre beaucoup moins consommatrices d'énergies. Ces nouvelles structures artificielles ont des applications potentielles et considérables dans le domaine des capteurs ou de stockage de l'information [5]. Les nombreuses techniques développées actuellement permettent de soutenir le rythme de croissance et de densité d'enregistrement magnétique qui double tous les ans depuis 1998.

L'aimantation du matériau magnétique massif est dominée par les nanostructures et leurs interactions, par contre la petite particule magnétique présente des propriétés intrinsèques des grandes interactions fondamentales de l'échange et de l'anisotropie.

Dans ce chapitre, nous allons examiner l'influence des géométries des nanocontacts sur la diffusion d'ondes de spin, dans une structure à triple chaînes de spins à orientations parallèles, (couplées ferromagnétiquement) et déposées sur un substrat non magnétique.

Nous commençons par une étude détaillée du réseau parfait, ensuite nous abordons la diffusion via les différentes configurations de nanocontacts par application de la méthode de raccordement [6-7]. Nous calculons évidemment toutes les grandeurs physiques transmission, réflexion et conductance magnonique des différents systèmes.

III.2. Dynamique des spins à couplage Ferromagnétiques dans le système parfait

Après avoir étudié la diffusion d'ondes vibratoires au chapitre précédent, nous nous intéressons maintenant à la propagation d'ondes de spins et le transport magnonique dans des systèmes magnétiques de basses dimensions. Nous traitons tout d'abord le cas parfait (voir le

réseau de la fig.3.1, ensuite nous considérons la présence de lacunes qui engendrent des rétrécissements appelés nanocontacts dans la partie 3.

Le mouvement de précession d'un vecteur de spin \vec{S} situé sur un site donné est décrit par un Hamiltonien d'Heisenberg, (équation de type Newton pour les phonons), décrivant toutes les interactions entre les spins. Il est donné par :

$$H = -2 \sum_{l,l'} J(l,l') \vec{S}_l \vec{S}_{l'} \dots\dots\dots(3. 1)$$

Où : $J(l,l')$ est un scalaire positif dans le cas d'un couplage ferromagnétique.

Il est appelé intégrale d'échange.

\vec{S}_l et $\vec{S}_{l'}$: les vecteurs de spins situés sur les sites l et l' du réseau magnétique.

Notre système modèle est composé de trois chaînes de spins parallèles ; et nous tenons compte uniquement des interactions d'échange entre premiers voisins, qu'on note \mathbf{J} .

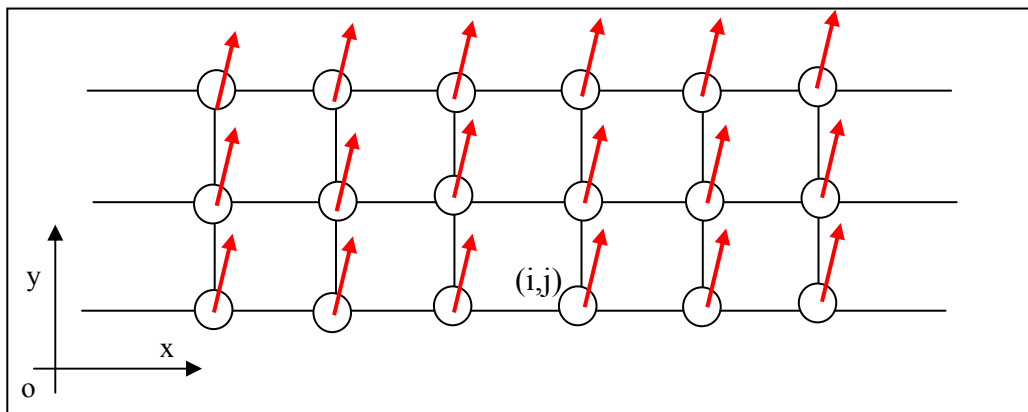


Fig.3.1 : Représentation schématique d'un réseau de spins ferromagnétiques à trois couches parallèles de spins.

a) équations de mouvement de précession des vecteurs de spins

*** Spin du site (i,j)**

$$\hbar \omega u(i, j) = 2JS\{3u(i, j) - u(i + 1, j) - u(i - 1, j) - u(i, j + 1)\} \dots\dots\dots(3. 2)$$

*** Spin du site (i,j+1)**

$$\hbar \omega u(i, j + 1) = 2JS\{4u(i, j + 1) - u(i + 1, j + 1) - u(i - 1, j + 1) - u(i, j) - u(i, j + 2)\} \dots\dots\dots(3. 3)$$

*** Spin du site (i,j+2)**

$$\hbar\omega u(i, j + 2) = 2JS\{3u(i, j + 2) - u(i + 1, j + 2) - u(i - 1, j + 2) - u(i, j + 1)\} \dots\dots\dots(3. 4)$$

Pour simplifier les calculs, nous avons introduit la notion de l'énergie normalisée définie par :

$$\Omega = \frac{\hbar\omega}{2JS}.$$

b) Relation de dispersion

En faisant intervenir les facteurs de phases le long de l'axe (ox) :

$$u(i \mp 1, j + \beta) = Z^{\mp 1} u(i, j + \beta) \dots\dots\dots(3. 5)$$

Où $\beta=0, 1$ ou 2 (ce qui représente la même colonne).

En devisant les équations (3. 2), (3. 3) et (3. 4) sur $2JS$, on obtient une matrice carrée $D_v(3 \otimes 3)$.

$$\begin{bmatrix} \Omega - 3 + Z + 1/Z & 1 & 0 \\ 1 & \Omega - 4 + Z + 1/Z & 1 \\ 0 & 1 & \Omega - 3 + Z + 1/Z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(i, j + 2) \\ u(i, j + 1) \\ u(i, j) \end{bmatrix} = 0$$

Les courbes de dispersion du système étudié sont données par :

$$\det[\Omega I - D_v(\vec{q}, Z)] = 0 \dots\dots\dots(3. 6)$$

Où : I est la matrice identité ($3 \otimes 3$) et D_v représente la matrice dynamique du système.

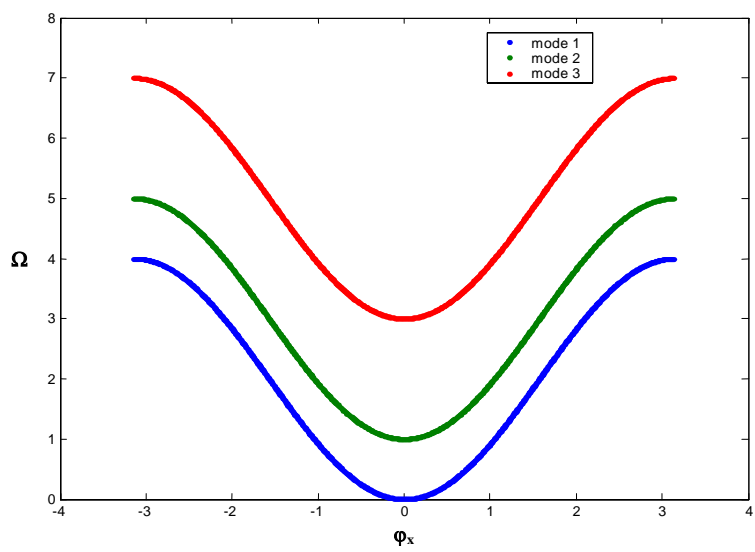


Fig.3.2 : Courbes de dispersion des magnons d'une structure à triple couches de spins à couplage ferromagnétique.

La résolution du système aux valeurs propres, donne accès aux trois modes propres Ω_v des magnons de la structure.

Sur la figure (3.2), nous avons présenté les courbes de dispersion du guide d'ondes parfait dans la première zone de Brillouin. Les modes nommés $i \in \{1, 2, 3\}$, du bas vers le haut respectivement se propagent dans les intervalles de fréquences :

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

mode 2 : $\Omega_2 = [1, \Omega_{2max} = 5]$,

mode 3 : $\Omega_3 = [3, \Omega_{3max} = 7]$.

Chacun des modes du guide d'ondes est soit symétrique ou antisymétrique par rapport à l'axe central dans la direction (ox).

Les modes symétriques correspondent aux précessions de rotation qui satisfont les conditions : $U_{n,m} = U_{n,M+1-m}$

Pour les modes antisymétriques ils satisfont : $U_{n,m} = -U_{n,M+1-m}$

Où M : est le nombre de chaînes le long de la direction (oy).

Le premier mode est acoustique et symétrique et les deux autres sont optiques.

c) Vitesses de groupe

C'est la vitesse de déplacement du paquet d'ondes (définie au chapitre II).

$$V_g = \frac{d\Omega}{dq} \dots\dots\dots(3. 7)$$

Pour déterminer cette vitesse, nous utiliserons une méthode basée sur la théorie standard des perturbations [8]. La forme explicite de la vitesse dans ce cas est donnée par :

$$V_g = -\bar{u}^t \frac{\partial D_v}{\partial q} \bar{u} \dots\dots\dots(3. 8)$$

Où : \bar{u} vecteur propre associé aux différents modes propres obtenus. D_v est la matrice dynamique du guide d'ondes parfait. $\frac{\partial D_v}{\partial q} = i \begin{bmatrix} Z-1/Z & 0 & 0 \\ 0 & Z-1/Z & 0 \\ 0 & 0 & Z-1/Z \end{bmatrix}$.

L'allure des vitesses de groupe est représentée sur la figure (3.3).

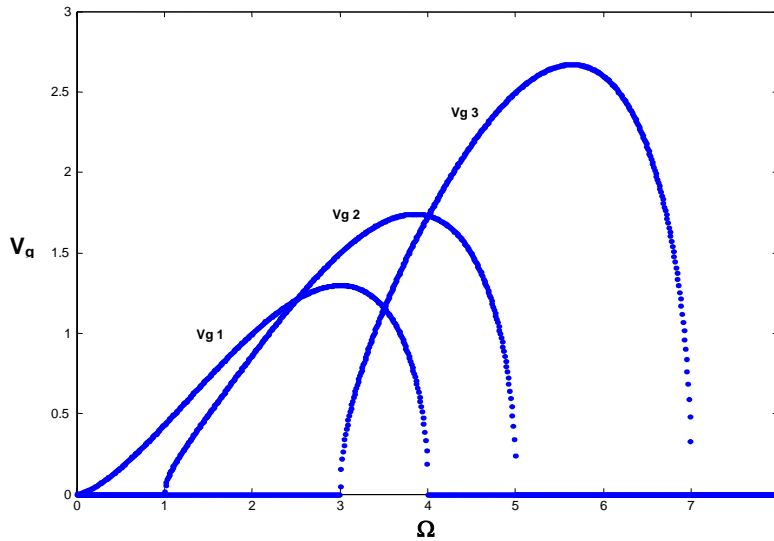


Fig.3.3 : Courbe des vitesses de groupe des différents modes du guide d’ondes parfait en fonction de Ω .

Nous constatons que les trois courbes évoluent globalement avec la même allure. Elles montrent des zones où les vitesses de groupe des différents modes se recouvrent, cela signifie que les modes peuvent être excités simultanément dans l’intervalle de fréquences $\Omega \in [3, 4]$.

Modes atténués

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

L’évolution des facteurs de phases Z_v en fonction de la fréquence Ω , est obtenue par la méthode de l’augmentation de la base [9]. Elle permet de linéariser le système en introduisant de nouvelles variables.

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

$$A(\Omega)\vec{W} = ZB\vec{W} \dots\dots\dots(3. 9)$$

A et B sont deux matrices extraites de D_v de taille $(6 \otimes 6)$.

(Les formes explicites sont données en annexe IV)

En résolvant numériquement le système d'équation formé par le couple (A, B), nous trouverons pour chaque fréquence Ω , six valeurs propres ainsi que les vecteurs propres correspondants.

III.3. Etude de la diffusion à travers un nanocontact magnétique

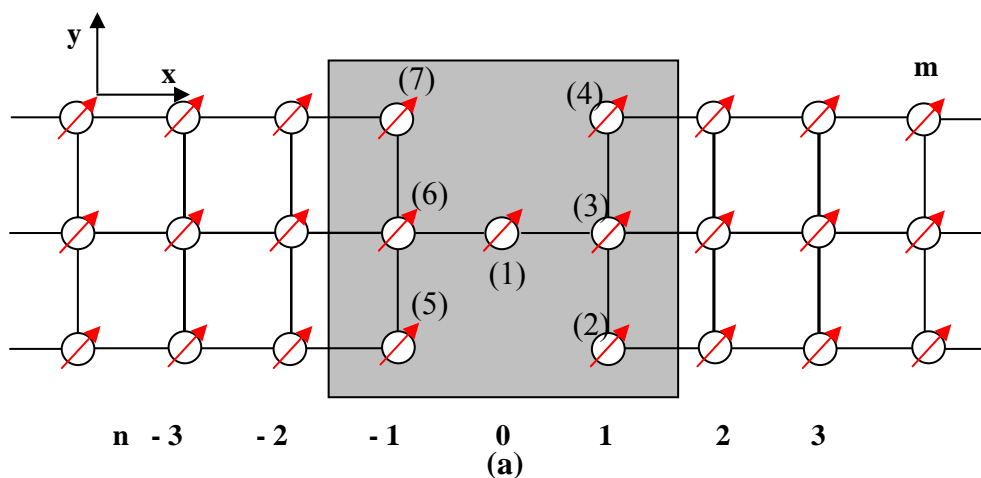
Dans cette partie, nous allons voir comment un nanocontact magnétique (un joint), dans une structure à spins ferromagnétiques, diffuse-t-il les ondes de spins ?

Nous suivons une procédure identique à celle utiliser dans le cas de la dynamique vibrationnelle. Nous examinons trois types de nanocontacts dans le réseau de spins à trois couches : (1) nanocontact engendré par deux lacunes symétriques, (2) nanocontact engendré par deux lacunes successives asymétriques, (3) nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques.

La forme des structures et l'allure des coefficients de réflexion et de transmission ainsi que la conductance magnonique des différents systèmes étudiés sont données sur les figures ci-après pour chaque configuration de nanocontact.

Pour la même configuration de nanocontact, nous examinons trois possibilités de l'environnement de l'échange magnétique, à savoir : adoucissement, homogénéité et durcissement de l'échange au niveau du domaine de nanocontact ($\gamma=J_d/J=0.9$, $\gamma=1.0$ et $\gamma=1.1$). Les résultats sont rangés en colonnes.

III.3.a. Nanocontact engendré par deux lacunes symétriques



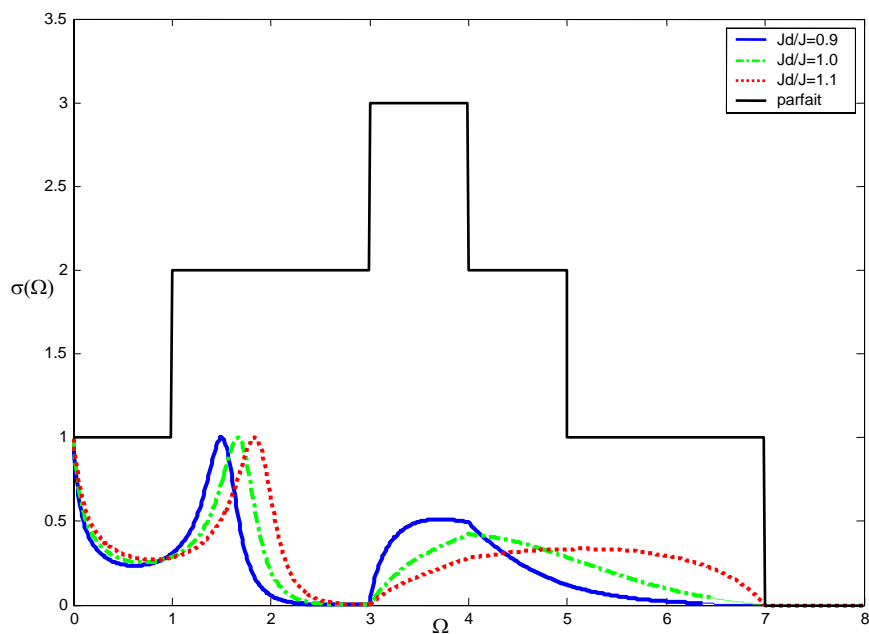
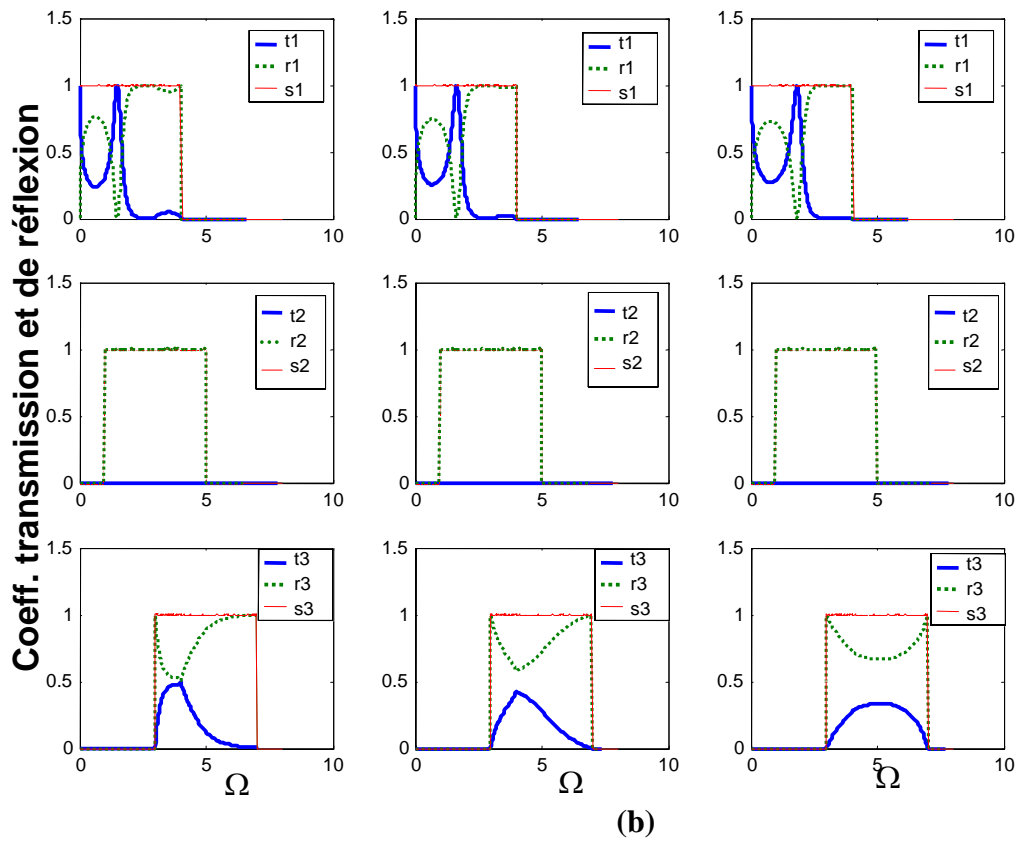
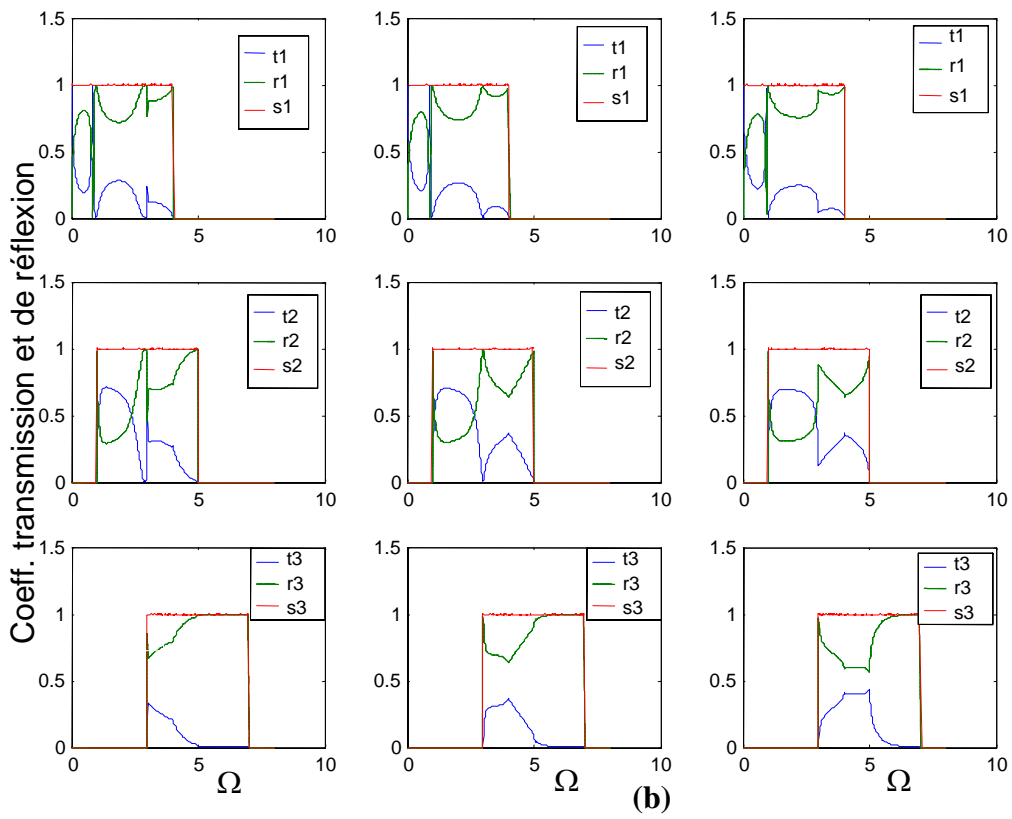
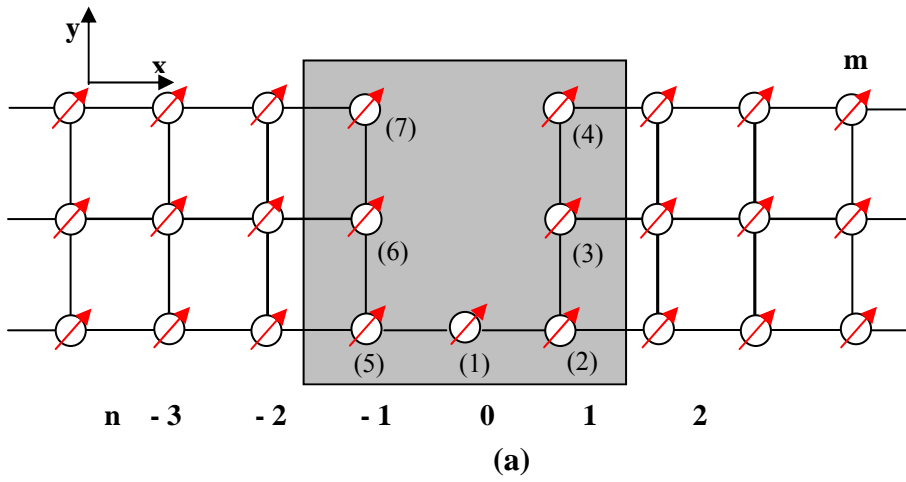


Fig.3.4 : (a) nanocontact magnétique engendré par deux lacunes symétriques.

(b) courbes de coefficients de transmission et de réflexion.

(c) conductance magnonique du nanocontact symétrique.

III.3.b. Nanocontact engendré par deux lacunes successives asymétriques



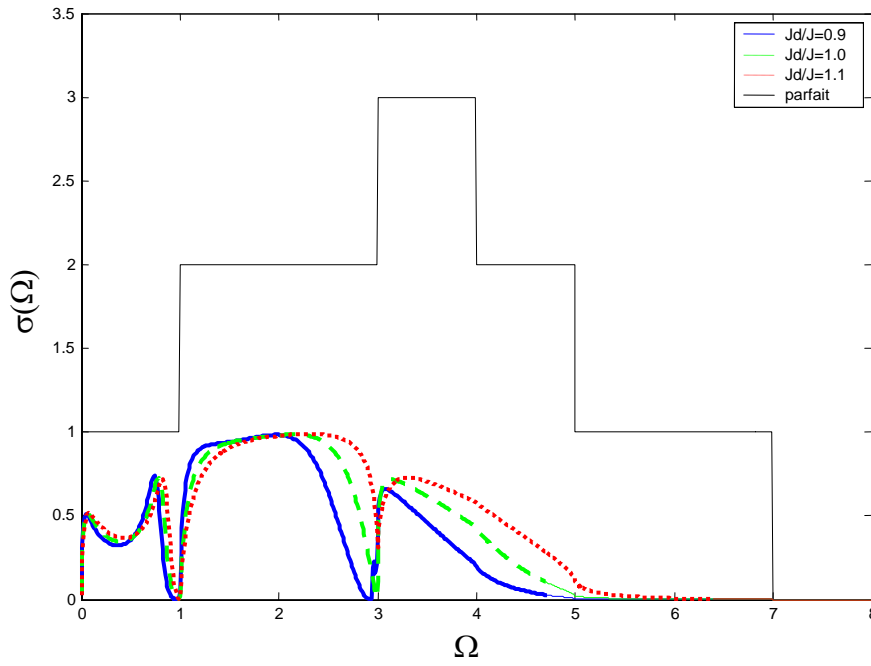
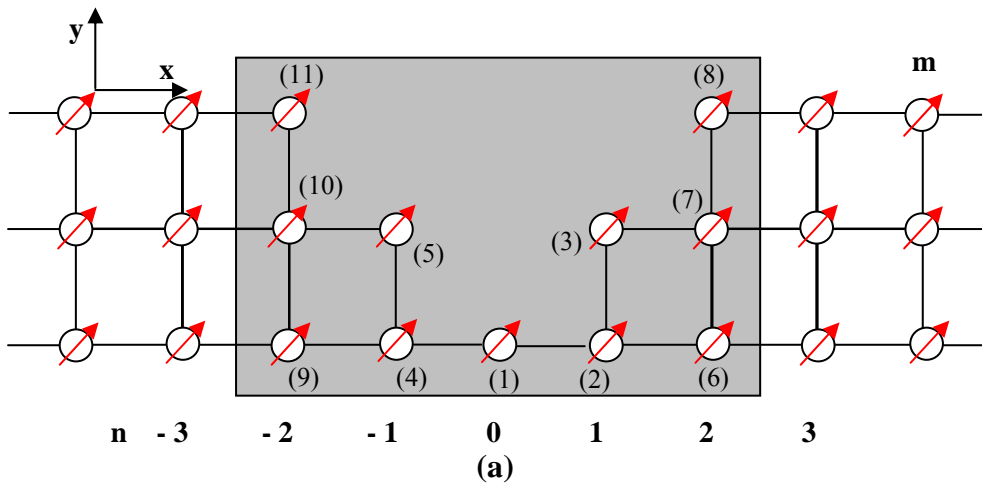


Fig.3.5 : (a) nanocontact magnétique engendré par deux lacunes asymétriques.
 (b) courbes de coefficients de transmission et de réflexion en fonction Ω .
 (c) conductance magnonique.

III.3.c. Nanocontact engendré par quatre lacunes asymétriques



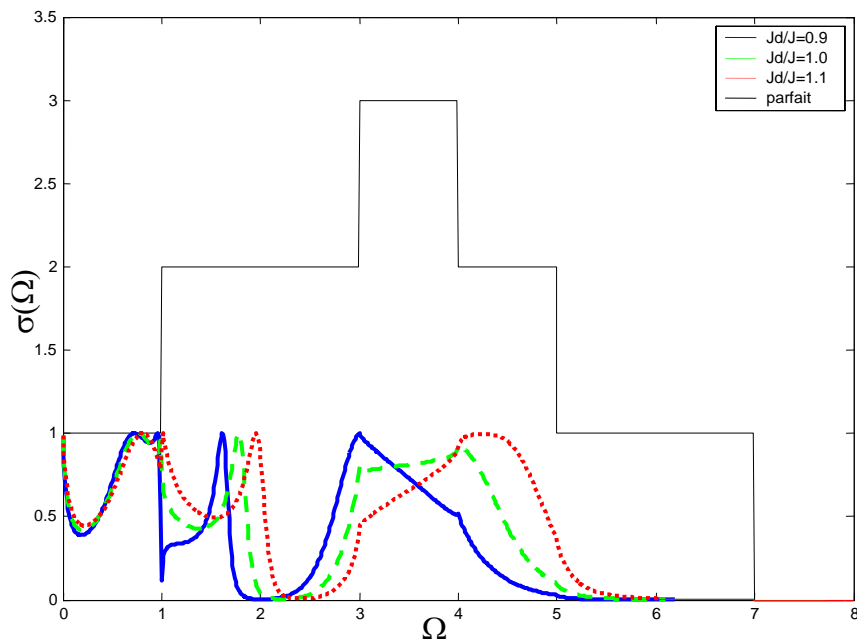
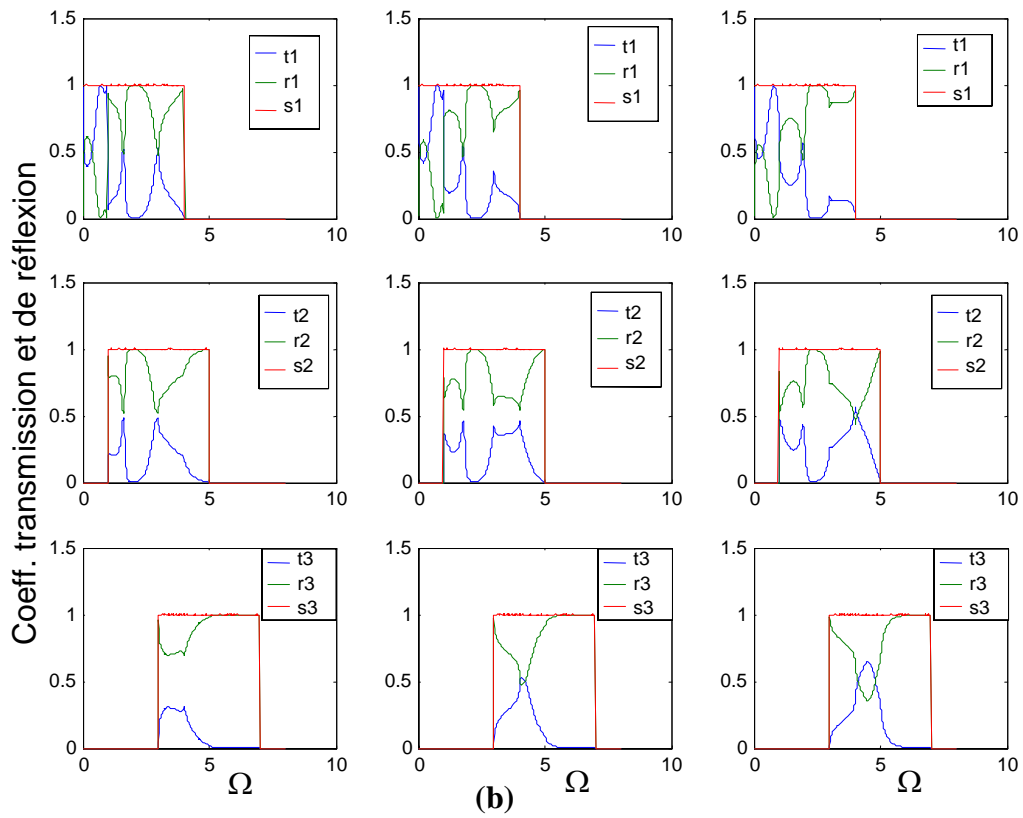


Fig.3.6 : (a) nanocontact magnétique engendré par plusieurs lacunes asymétriques.
 (b) courbes de coefficients de transmission et de réflexion en fonction de Ω .
 (c) conductance magnonique de la deuxième forme de nanocontact.

III.4. Discussion des résultats

Nous présentons des résultats numériques concernant la diffusion d'ondes de spin ferromagnétiques se propageant de gauche vers la droite via des nanocontacts atomiques dans une structure à trois chaînes de spin parallèles déposées sur un substrat non magnétique.

Nos résultats n'adressent aucune expérience particulière. Néanmoins, il est intéressant de signaler que les systèmes expérimentaux actuellement qui sont les plus appropriés pour l'étude théorique du transport de magnons, présenté dans ce chapitre, seraient probablement les jonctions et les points de contacts magnétiques.

Les résultats de nos applications numériques de notre modèle sont présentés pour trois configurations géométriques différentes dans le domaine du nanocontact. Pour chaque configuration, nous avons analysé la conductance de magnons pour trois possibilités de l'environnement magnétique dans le domaine nanocontact, comparé à l'échange magnétique dans la zone parfaite composée de trois chaînes. Ces trois possibilités sont pour $\gamma=0.9$, $\gamma=1.0$ et $\gamma=1.1$. Où γ est égale à l'intégrale d'échange de la zone nanocontact sur l'intégrale d'échange parfait.

Pour $\gamma < 1$ ($\gamma > 1$), un adoucissement (durcissement) magnétique a pris place dans le domaine de nanocontact. Pour $\gamma=1$, l'échange est identique partout (cas homogène). Les trois configurations de nanocontacts et les résultats numériques de diffusion de magnons sont regroupés sur les figures (3.4), (3.5) et (3.6) respectivement.

Les résultats qui se rattachent au premier type de nanocontact engendré par deux lacunes symétriques sont représentés sur la figure (3.4). La configuration schématique du domaine de nanocontact est donnée sur la figure (3.4a) où le joint atomique est placé symétriquement dans le système.

La figure (3.4b) présente les coefficients de transmission et de réflexion dans les trois modes de magnons. Ils sont rangés en colonnes pour les variations de l'échange magnétique local dans le domaine de nanocontact, de l'adoucissement à gauche au durcissement à droite ; et les lignes correspondent aux modes, en classant le mode 1 en haut et le troisième en bas.

La transmission et la réflexion vérifiées dans chaque mode de magnon la condition d'unitarité. Cette relation est utilisée comme test de contrôle de nos calculs.

Cependant la figure (3.4c) présente la transmission totale conductance de magnons $\sigma(\Omega)$ dans l'intervalle de fréquence $\Omega \in [0, 7]$. La conductance du système parfait considérée comme référence est également représentée afin de faire une comparaison et de noter les changements et les modifications induits par la présence du nanocontact.

La courbe de la conductance, du système idéal (sans les nanostructures), permet de distinguer plusieurs zones (intervalles de fréquences) :

$\Omega \in [0, 1]$ et $\Omega \in [0, 1]$: un seul mode qui peut être excité.

$\Omega \in [1, 3]$ et $\Omega \in [4, 5]$, on peut exciter deux modes simultanément.

$\Omega \in [3, 4]$ ici les trois modes peuvent être excités en même temps.

De la même manière, les résultats numériques correspondant aux deux autres configurations de nanocontacts qui sont engendrées respectivement par deux lacunes et plusieurs lacunes asymétriques, sont tracés sur les figures (3.5) et (3.6).

Les résultats montrent des caractéristiques générales et certaines caractéristiques spécifiques pour chaque configuration géométrique de la zone nanocontact.

Nous remarquons que la conductance est inférieure ou égale à un seul mode de magnon dans l'intervalle $[0, 7]$, pour les trois types de nanocontacts. Ceci illustre comment le spin de joint atomique dans chaque configuration contribue à la transmission d'ondes de spin dans un mode donné de magnon.

Une autre caractéristique générale de la conductance magnonique est le déplacement de ses spectres vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique dans le domaine de nanocontact, dans les trois configurations.

Certains maximums spectraux dans l'intervalle de fréquence $[0, 7]$, correspondent aux résonances de Fano dues aux interactions entre les modes de précession localisés dans le domaine de nanocontact avec le continuum du guide d'ondes parfait, voir les références [10-11], pour des discussions détaillées des résonances de Fano.

Ces états localisés caractérisent les ondes de spin d'amplitude de précession décroissante avec la distance à partir du domaine de nanocontact dans les systèmes étudiés. Ceci est en conformité avec les modes évanescents des trois chaînes. Leur énergie se déplace naturellement vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique de la zone nanocontact.

Les trois modes de précession excitent chaque configuration dans des intervalles de fréquence bien déterminés. Ces limites correspondent aux intervalles de fréquence où les vitesses de groupe sont non nulles.

En particulier, pour le premier et symétrique nanocontact atomique, les oscillations du spectre de conductance attribuées aux résonances de Fano, Ω_f , correspondent aux maximum qui se décale vers les hautes fréquences $\Omega_f = 1.50, 1.66$ et 1.85 , avec le durcissement de l'échange $\gamma=0.9$, de 1.0 et de 1.1 , comme dans la figure (3.4c).

En comparant la figure (3.4b) et la figure (3.4c), nous observons que c'est les magnons du mode 1 qui contribuent efficacement aux résonances de Fano dans tout le spectre de conductance. En revanche les magnons du mode 2 ont un comportement particulier, ils sont complètement réfléchit dans leur intervalle entier de propagation. Techniquement, nous pouvons dire que le nanocontact atomique parfaitement symétrique filtre dehors ces magnons optiques asymétriques du mode 2, ce qui s'explique par le découplage des modes propageants et les états localisés symétriques de précession.

En outre, les magnons du mode 2 ne sont pas couplés, dans le domaine de nanocontact, aux deux autres modes 1 et 3 de magnons, ce qui mène aux spectres d'une conductance qui est relativement bien défini dans les intervalles de propagation des modes 1 et 3.

La forme de la conductance, près de $\Omega=3$, $\Omega = 4$ et $\Omega = 7$ dans la figure (3.4c), correspond par conséquent au comportement critique des modes 1 et 3 de magnon aux limites de leurs intervalles de propagation. Les larges oscillations dans l'intervalle $[3, 7]$, qui se décalent à des fréquences plus élevées avec l'augmentation de γ , ne correspondent pas aux résonances de Fano, et sont partiellement goupillés à $\Omega = 4$ dû à l'interaction du mode 3 avec des magnons du mode 1 dans le domaine de nanocontact.

Notons que le troisième mode de magnon, qui est optique, à haute énergie ne montre aucune résonance de Fano dans les trois configurations de nanocontacts. Il est partiellement transmis dans son intervalle de propagation dans le cas du nanocontact symétrique et il est complètement filtré à l'extérieur pour $\Omega \in [5, 7]$, dans les deux nanocontacts asymétriques.

Pour le deuxième type de nanocontact, engendré par deux lacunes asymétriques, la position des oscillations attribuées aux résonances de Fano se décale aussi vers les hautes fréquences, sur la figure (3.5c), $\Omega_F = 0.70, 0.74$ et 0.78 respectivement pour $\gamma=0.9, \gamma=1.0$ $\gamma=1.1$.

Ces résonances, de formes similaires à celles observées sur la figure (3.4c), sont dues aussi aux interactions entre le continuum et le mode 1.

Cependant, les états localisés de précession se trouvent à des fréquences moitié de celles observées dans le cas du nanocontact symétrique. La réduction de leurs valeurs est peut être attribuée à la réduction des interactions magnétiques dans le domaine de nanocontact comparativement au premier nanocontact.

Les pics de grande largeur dans les intervalles $[1, 3]$ et $[3, 7]$, de la figure (3.5c), qui se déplacent vers les hautes fréquences avec le durcissement de γ , ne correspondent aux résonances de Fano. Ces pics sont goupillé à $\Omega=3$ et $\Omega=4$, ce qui s'explique par l'interaction du mode 2 avec respectivement le mode 3 et 1 dans le domaine de nanocontact. (Pour des détails, voir la première et la deuxième lignes de la figure (3.5b)).

Ceci confirme le non Fano caractère des oscillations larges, et le comportement critique des magnons des modes 2 et 3 à la limites des leurs intervalles de propagation respectifs.

En dernier, dans le troisième nanocontact, qui est asymétrique, la position du pic de résonances de Fano, observé dans le spectre de conductance, se décale vers les hautes fréquences $\Omega_f = 1.64, 1.82$ et 2.00 , avec l'augmentation de $\gamma=0.9, 1.0$ et 1.1 , comme dans la figure (3.6c). Ces résonances sont le produit de l'interaction des états localisés de précession avec les modes propageants, elles sont différentes de celles du nanocontact symétrique.

En outre, les effets de la brisure de symétrie se ressemblent pour les nanocontacts asymétriques de la figure (3.5) et la figure (3.6), le spectre de conductance change rigoureusement.

Absent du nanocontact symétrique (pour la considération de symétrie), et aussi absent dans le deuxième nanocontact (parce que les états localisés de précessions de se trouvent énergiquement au-dessous de son intervalle de propagation), les magnons du mode 2 agissent l'un sur l'autre avec les états localisés caractéristiques dans le troisième nanocontact asymétrique pour produire des résonances de Fano.

Ces résonances, observées sur la fig.3.6b, sont par conséquent dues à l'interaction du continuum de magnons du mode 1 aussi bien que celle des magnons du mode 2, avec les états localisés de précession du domaine de nanocontact.

En revanche les oscillations larges observées dans l'intervalle $[\sim 2,5, \sim 5,5]$, ne correspondent pas aux résonances de Fano, et ce pour les mêmes raisons citées plus haut.

Une observation intéressante, est la conductance totale de magnon $\sigma(\Omega)$ relativement important à travers le nanocontact atomique simple parfaitement symétrique dans l'intervalle $\Omega \in [5, 7]$, quand les deux autres modes cessent d'exister en tant que propagation des modes. En revanche le $\sigma(\Omega)$ est réfléchi et est filtrée techniquement complètement dehors, par le nanocontact asymétrique dans cet intervalle de fréquence. Par conséquent, le troisième mode de magnon soit optique symétrique.

En conclusion, nous avons présenté un modèle de calcul des propriétés de transport cohérent de magnons via des nanocontacts atomiques. L'objectif est de donner et de comprendre la relation entre les conductances de magnons en présence de nanocontacts et leurs propriétés de symétrie.

Les nanocontacts sont considérés comme des joints magnétiques entre deux sous groupes de trois chaînes monoatomiques de spins à couplage ferromagnétique avec des interactions d'Henseinberg. Il est aussi intéressant de noter que dans de récentes références [12-16] concernant la brisure de symétrie magnétique aux points de jonction, la plupart de leurs propriétés dérivent des résonances des états localisés dans le domaine de jonction.

Références : chapitre III

- [1] F. Gagel and K. Maschke, *phys. Rev.*, **B 52**, 2013 (1995)
- [2] R. Chadli, mémoire de Magister, Université de T. Ouzou (2004)
- [3] S. Irene, mémoire de Magister, Université de T. Ouzou (2001)
- [4] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université de Tizi Ouzou (2001)
- [5] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater and M. Abou Ghantous, *Eur. Phys. J. Appl. Phys* 37, 25 (2007)
- [6] D. Zhao, Freng Liu, D. L. Huber and M. G. Lagally, *J. Appl. Phys.* **91**, 5 (2002)
- [7] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 20, 4725 (1987)
- [8] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addato and N. Auby, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 21, 2113 (1988)
- [9] A. Fellay, Travail d'ingénieur Physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996)
- [10] A.R.P. Rau, *Physica Scripta* 69, 1 (2004)
- [11] U. Fano, *Phys. Rev.* 124, 1866 (1961)
- [12] A. N. Chantis, K. D. Belashchenko, E. Y. Tsymbal, M. Van Schilfgaarde, *Phys. Rev. Lett.* 98, 046601 (2007)
- [13] J. D. Burton, R. F. Sabirianov, J. P. Velov, O. N. Mryasov, E. Y. Tsymbal to be published, arxiv.org/pdf/cond-mat/07033454
- [14] K. I. Bolotin, F. Kuemmeth, A. N. Pasupathy, D. C. Ralph, *Nano Lett.* 6, 123 (2005)
- [15] A. V. Khavalkovskii, K. A. Zvezdin, A. K. Zvezdin, *Microelectronic engineering* 81, 336 (2005)
- [16] M. Viret et al *Phys. Rev. B* 66, 220401 (2002)

Chapitre IV

Densités spectrales et densités d'états vibrationnelle et magnonique.

La matrice dynamique D d'un système constitue l'outil de base pour l'étude et la description des états vibrationnels (phonons) et le mouvement de précession des spins (magnons) au voisinage des nanostructures et en volume (la zone parfaite). Elle peut être utilisée aussi, pour calculer certaines grandeurs physiques, comme les densités spectrales et les densités d'états [1-2].

Le moyen le plus approprié et direct pour les déterminer est l'opérateur de Green associé à la méthode de raccordement [2-8].

Cet opérateur est obtenu à partir de la matrice dynamique du système.

(Pour le détail de calcul des éléments consulter l'annexe V).

IV.1. Densités spectrales et densités d'états

IV.1.1. Densité vibrationnelle

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

$$\gamma(\omega) = \sum_p \delta(\omega - \omega_p) \dots \dots \dots (4. 1)$$

$\gamma(\omega)$: Représente physiquement le nombre d'états de vibration à la fréquence ω .

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

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum \gamma_n(\omega) \dots \dots \dots (4. 2)$$

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

$$\gamma_n(\omega) = \sum_p \langle e_n | u_p \rangle \delta(\omega - \omega_p) \dots \dots \dots (4. 3)$$

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

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon/\pi}{(\omega^2 - \omega_p^2) + \varepsilon^2} = \delta(\omega^2 - \omega_p^2) \dots \dots \dots (4. 4)$$

On trouve :

$$\gamma_n(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \dots \dots \dots (4. 5)$$

D'après (1. 10), les valeurs propres ω_p^2 de D représentent les pôles des éléments de l'opérateur G(ω^2).

Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire ε à la variable ω^2 , ce qui donne :

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} \langle e_n | G(\omega + j\varepsilon) | e_n \rangle \dots \dots \dots (4. 6)$$

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

La matrice de densité spectrale pour un vecteur d'ondes parallèle au nanocontact est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\Omega) = \Omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) = 2\Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{ll'}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (4. 7)$$

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

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

$$N(\Omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{l,l'}(\Omega) = (-2\Omega/\pi) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\alpha}^{ll}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (4. 8)$$

IV.1.2. Densités magnoniques

De la même manière que le cas des phonons, l'opérateur de Green s'exprime sous la forme :

$$G(\Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - D(Z, J)]^{-1} \dots \dots \dots (4. 9)$$

La matrice des densités spectrales est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha, \beta)}^{(p, p')}(\Omega) = \sum_m L_{\alpha m}^p \cdot L_{\beta m}^{p'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) \dots \dots \dots (4. 10)$$

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

La densité d'état magnonique correspond à la somme de la trace des matrices des densités spectrales peut alors s'écrire ainsi :

$$N(\Omega) = \sum_{\alpha} \rho_{(\alpha, \alpha)}^{p, p}(\Omega) = (-1/\pi) \sum_{p, \alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im}[G_{\alpha\beta}^{pp'}(\Omega + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (4. 11)$$

IV.2 Résultats

IV.2.a. Les phonons : L'évolution des courbes des densités spectrales et des densités d'états des phonons des différents atomes formant le site irréductible pour les trois types de nanocontacts étudiés au chapitre II sont représentées sur les figures : (5. 1), (5. 2) et (5, 3) . Et ce pour trois possibilités : adoucissement, égalité et durcissement des contraintes au niveau du domaine de nanocontact.

a) nanocontact engendré par deux lacunes symétriques

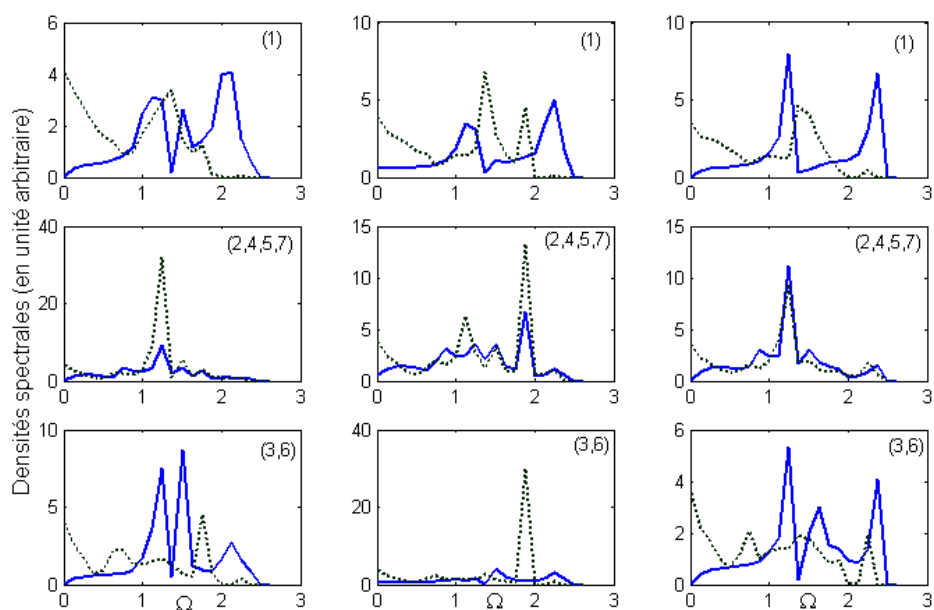


Fig.4.1a

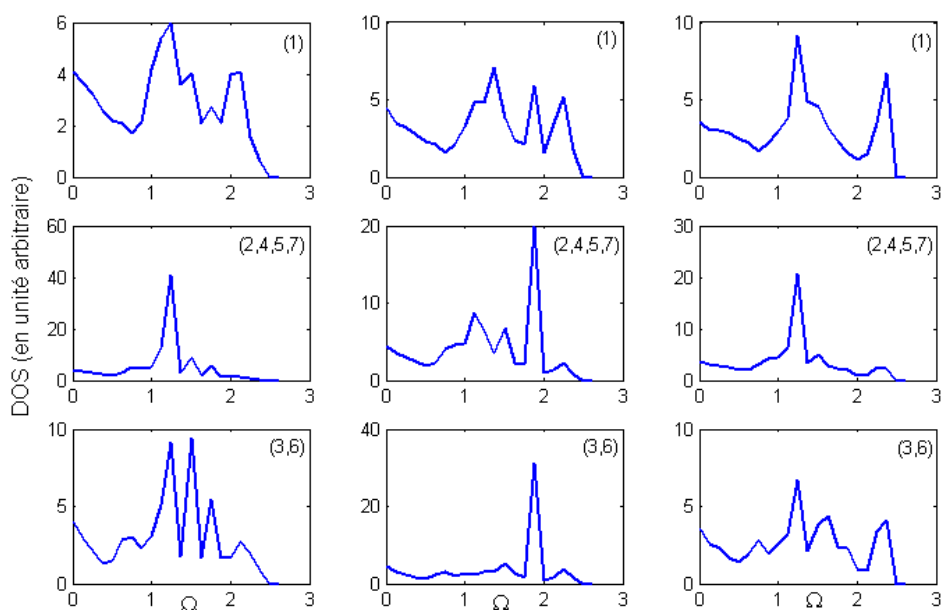


Fig.4.1b

Fig.4.1 : (a) Courbes des densités spectrales, suivant la direction (ox) (trait plein) et suivant la direction (oy) (traitillés).

(b) DOS des atomes de la zone nanocontact engendré par deux lacunes symétriques.

Les résultats : adoucissement, égalité et durcissement sont classés respect par colonnes 1, 2, 3.

b) nanocontact engendré deux lacunes asymétriques

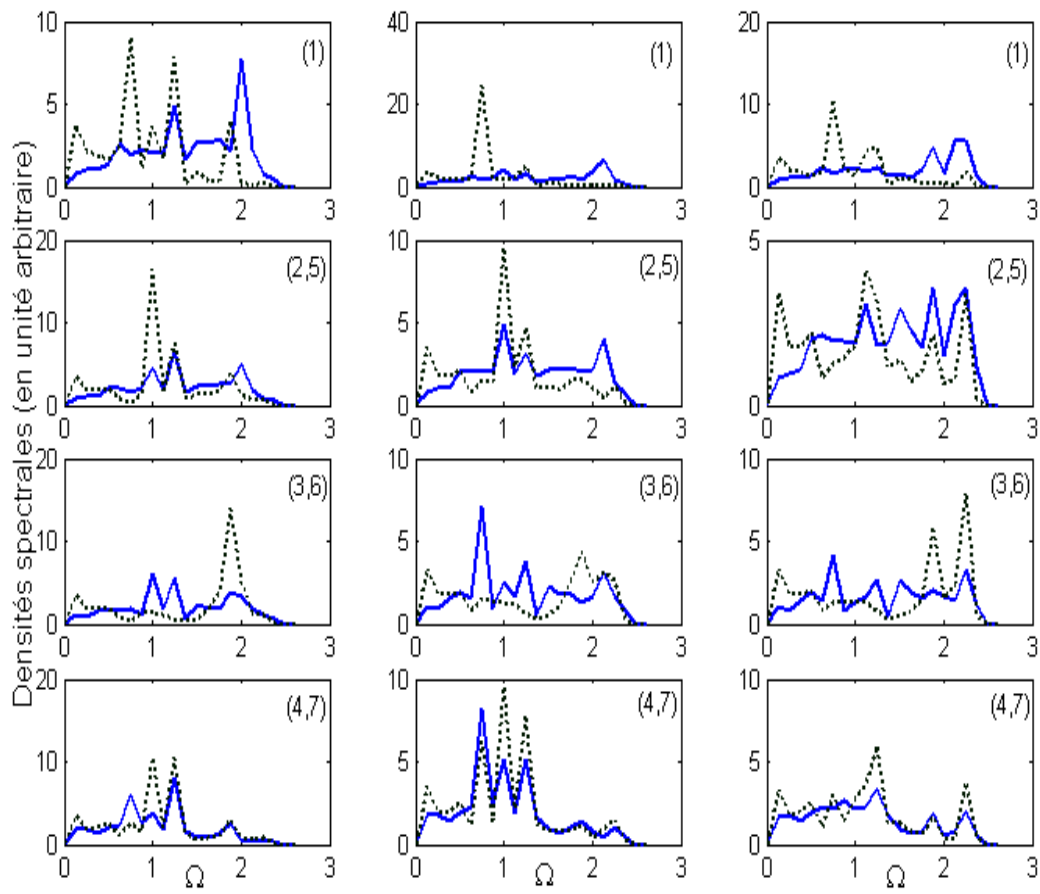


Fig.4.2a

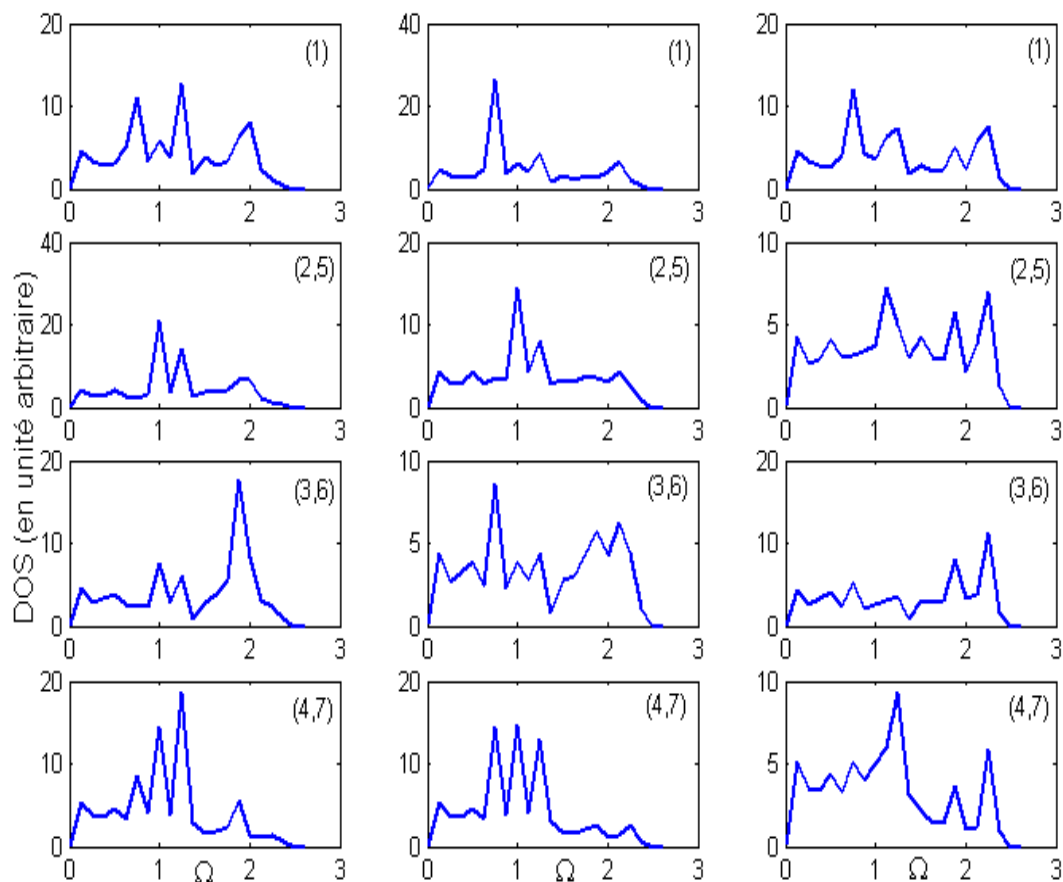


Fig.4.2b

Fig.4.2 : (a) Courbes des densités spectrales, suivant la direction (ox) (trait plein) et suivant la direction (oy) (traitillés).

(b) DOS des atomes de la zone nanocontact engendré par deux lacunes asymétriques.

Les résultats en fonction de la variation des constantes de force locales dans le domaine du nanocontact (adoucissement, homogénéité et durcissement) sont classés respectivement par colonnes 1, 2 et 3.

c) nanocontact engendré par plusieurs lacunes

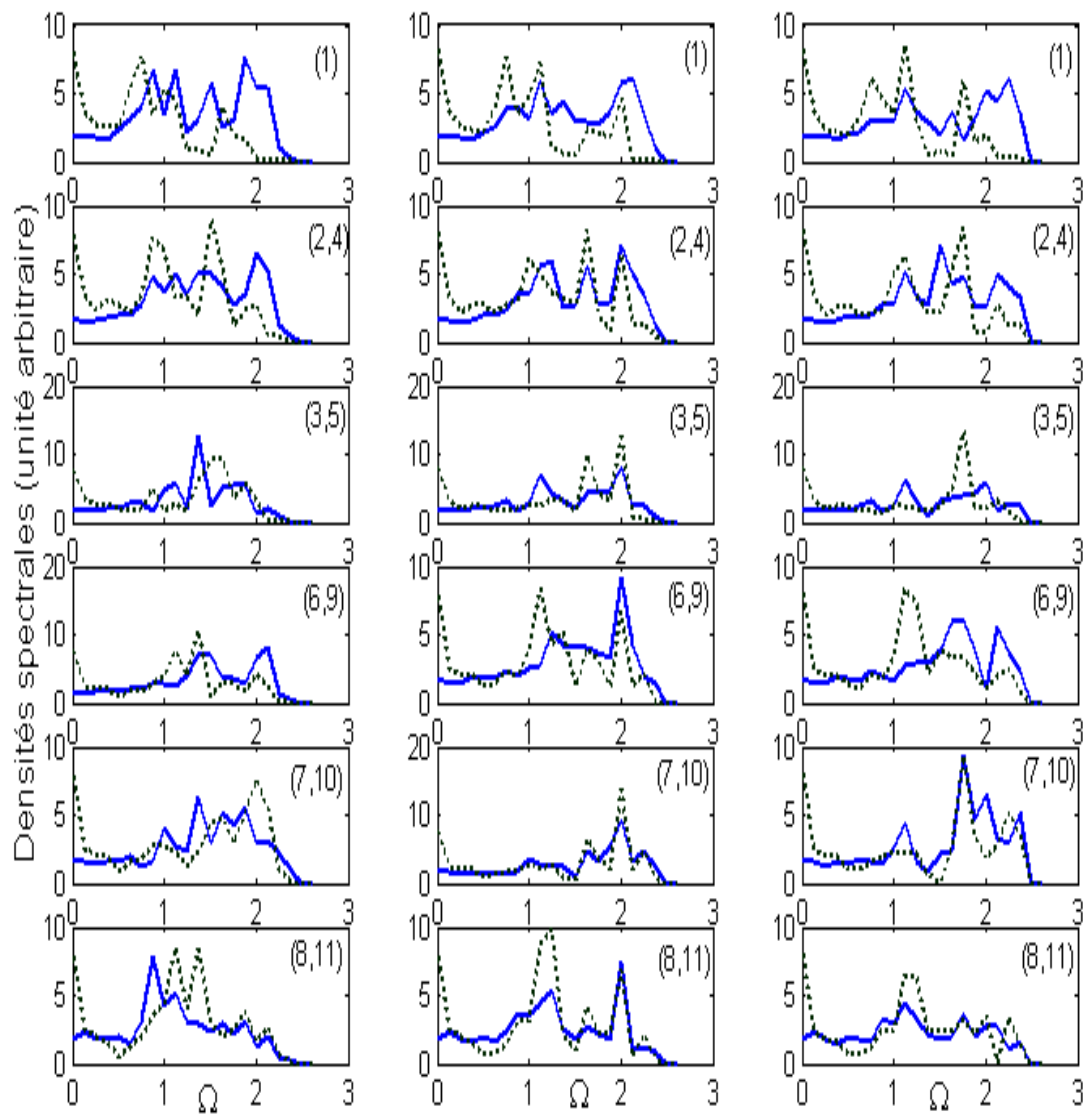


Fig.4.3a

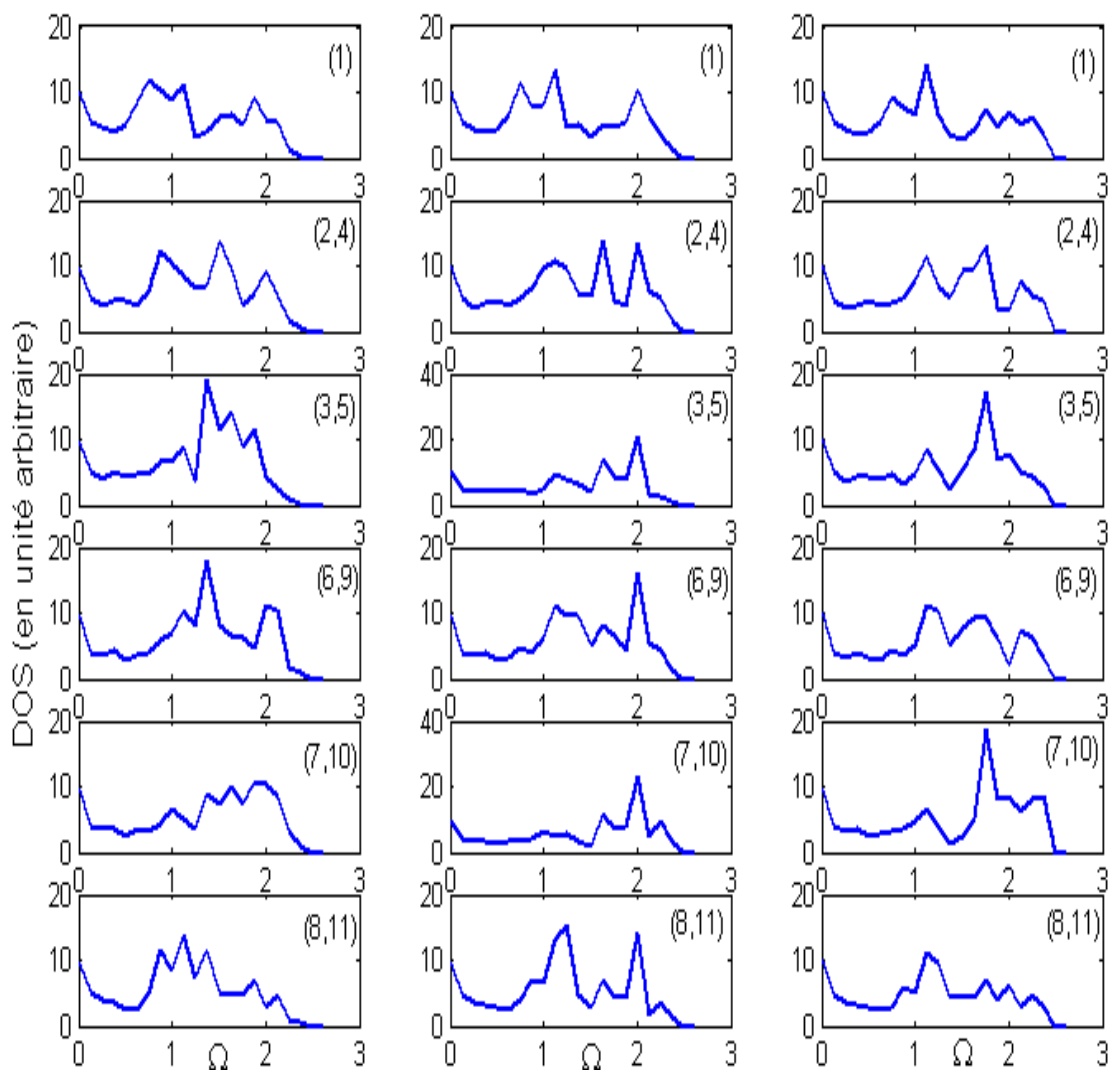


Fig.4.3b

Fig.4.3 : (a) Courbes des densités spectrales, suivant la direction (ox) (trait plein) et suivant la direction (oy) (traitillés).

(b) DOS des atomes de la zone nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques.

Les résultats : adoucissement, égalité et durcissement sont classés respect par colonnes 1, 2, 3.

IV.2.b. Cas des magnons

Les courbes des densités d'états magnoniques pour les trois types de nanocontacts, étudiés au chapitre III, sont représentées sur les figures : fig.4.4, dans le cas de deux lacunes symétriques, fig.4.5, dans le cas de deux lacunes asymétriques et fig.4.6, dans le cas de plusieurs lacunes asymétriques. Le rapport J_d/J est noté par γ .

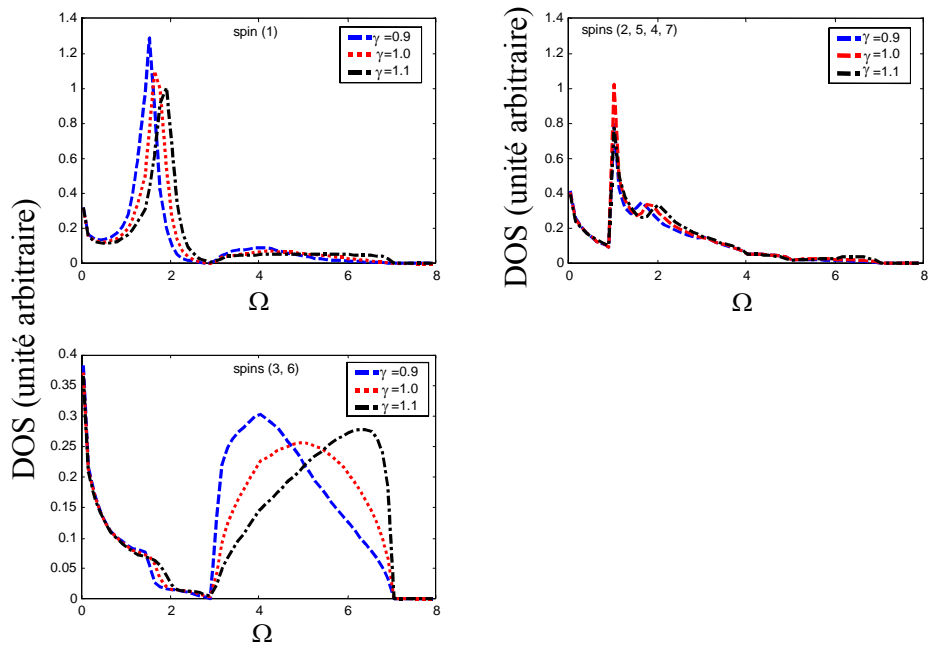


Fig.4.4 : DOS des magnons dans le cas du nanocontact symétriques.

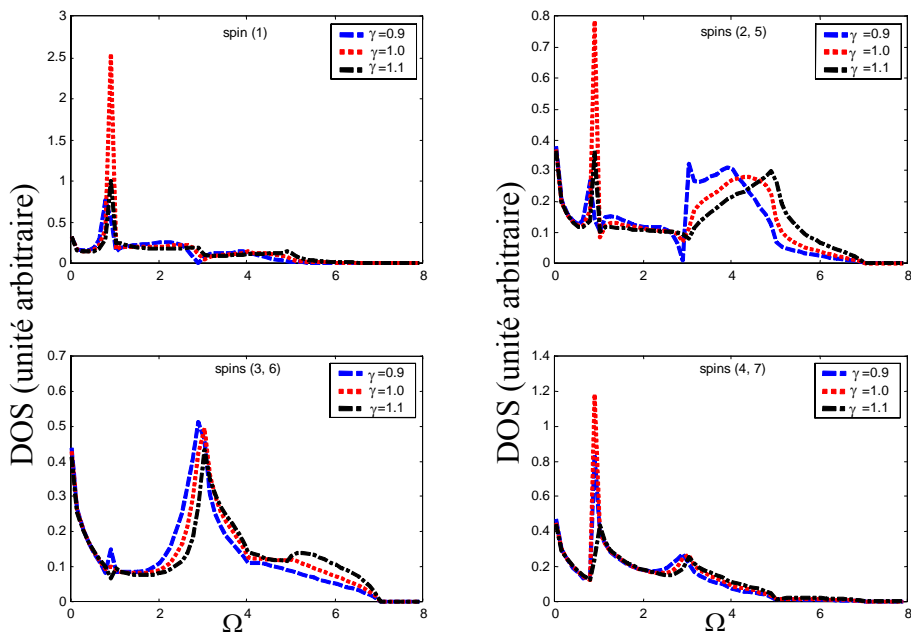


Fig.4.5 : DOS des magnons dans le cas du nanocontact asymétriques.

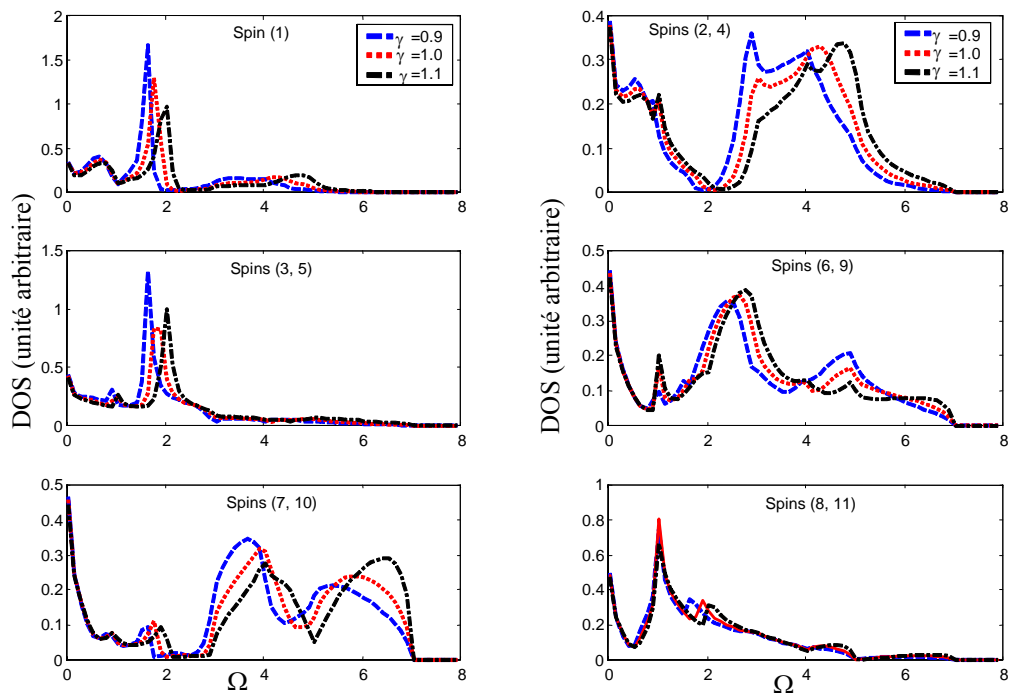


Fig.4.6 : DOS des magnons dans le cas du nanocontact engendré par plusieurs lacunes asymétriques.

IV.3. Interprétation des résultats :

a) Cas des phonons

Le calcul numérique est effectué pour trois types configurations géométriques de nanocontacts, qui sont engendrés par :

- 1) deux lacunes symétriques ;
- 2) deux lacunes asymétriques ;
- 3) quatre lacunes asymétriques.

Pour chaque configuration, nous avons examiné trois possibilités du choix de l'environnement des constants élastiques dans le domaine propre du nanocontact par rapport à la structure parfaite. Celles-ci sont respectivement :

- (i) $r_{1d}=0.9$ et $r_{2d}=0.65$
- (ii) $r_{1d}=1.0$ et $r_{2d}=0.75$
- (iii) $r_{1d}=1.1$ et $r_{2d}=0.85$.

Le but de ce procédé numérique est d'étudier aussi comment la dynamique vibrationnelle locale répond aux changements locaux de l'environnement élastique dans trois possibilités. Le premier cas (i) correspond à un adoucissement des constants élastiques dans le domaine du nanocontact, par rapport au système idéal. Le deuxième cas (ii) correspond à la situation où les constantes élastiques sont homogènes dans l'ensemble des domaines. En revanche, le troisième cas (iii) correspond à un durcissement des constantes. Ces possibilités sont semblables aux situations où les changements des constantes élastiques peuvent intervenir à proximité des marches et des replis dans les surfaces [9].

L'évolution des spectres des densités spectrales des phonons, des différents emplacements atomiques situés aux sites irréductibles (zone nanocontact) indiqués sur les figures des guides du chapitre II, suivant les deux directions (ox) et (oy), exprimés en unités arbitraires, en fonction de la fréquence normalisée Ω dans la zone de Brillouin. Les résultats des différents sites atomiques sont présentés sur les figures (4.1a), (4.2a) et (4.3a).

Les spectres montrent des pics et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence $[0, 2.5]$, pour l'ensemble des valeurs de k_{1d} et k_{2d} . Les trois colonnes correspondent de gauche à droite respectivement aux cas notés (i), (ii) et (iii).

Dans le premier type de nanocontact (engendré par deux lacunes symétriques), les densités spectrales de l'atome de nanocontact (le joint), noté (1) sur la structure, ne changent pas

sensiblement avec les variations des constantes dans le domaine. Ceci peut être due à sa position centrale comme contact de masse (qui couple) symétriquement entre les deux systèmes semi infinis du gauche et de droite. Par contre les autres emplacements et les autres configurations de nanocontacts sont sensibles aux différents changements.

On note une multitude de pics de résonances de formes variées, et d'amplitudes différentes, leur nombre, leur hauteur et leur largeur dépendent fortement des paramètres du système (k_{1d} , k_{2d}) dans la zone nanocontact pour les trois configurations.

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

D'après les courbes des densités spectrales, les oscillations sont plus importantes suivant la direction (oy) que suivant l'axe (ox), ceci s'explique par l'épaisseur réduite de notre modèle, dans les trois géométries de nanocontacts examinées.

L'étude d'un grand nombre de ces courbes (en fonction des différents paramètres), ainsi que l'observation des mouvements des atomes, aux fréquences de résonances, permettraient sans doute de classer et de caractériser les modes locaux de vibration.

Comme prévu, certains sites atomiques de la même configuration de nanocontact, ayant le même environnement, ont le même spectre de vibration. Ces résultats sont conformes aux effets évidents de symétrie dans chacune des trois géométries de nanocontacts considérées.

Nous avons également calculé les densités d'états (DOS) pour les différents sites du domaine du nanocontact. Les résultats sont présentés sur les figures (4.1b), (4.2b) et (4.3b), et sont rangés de la même manière que ceux des densités spectrales.

Ces figures présentent une richesse en pics plus importante dans le cas de plusieurs lacunes, cela est justifiable car le nombre d'états localisés est plus important.

Pour une fréquence donnée, les résonances du système se déplacent vers les hautes fréquences avec l'augmentation des constantes de forces (dureté).

D'après les courbes des DOS, les densités d'états des sites ayant le même environnement atomique sont similaires, comme on pouvait le prévoir.

Tout les sites atomiques, des trois configurations et dans les trois possibilités, présentent une oscillation collective aux environs de la fréquence $\Omega = 0.5$. Cette dernière se déplace vers les hautes fréquences avec le durcissement des constantes de force.

On constate sur les courbes que la plupart des spectres de vibration sont essentiellement suivant la direction (oy), notamment le joint atomique (noté 1), car ce dernier a une grande liberté de mouvement suivant la direction (oy) et ce à cause de la taille finie de la structure et surtout au niveau du domaine de nanocontact.

Les atomes des coins, dans les trois nanocontacts, ne présentent pas d'autres oscillations à part celle observée à $\Omega = 0.5$. Cela explique le confinement de ces sites.

Les atomes alignés avec le joint atomique le long de l'axe (ox), dans chaque configuration, présentent des DOS qui diminuent en intensité (hauteur) avec le durcissement des constantes élastiques.

Les atomes notés par (1), dans chaque nanocontact, ont des résonances spécifiques qui n'existent pas dans les autres sites. Elles se situent pour le premier nanocontact à $\Omega = 1.33$, dans le deuxième à $\Omega = 1.30$ et dans le troisième à $\Omega = 1.50$.

Les sites atomiques se trouvant sur la chaîne du milieu (la chaîne centrale) présentent une grande richesse en pics, car c'est elle qui couple le mouvement des deux autres chaînes.

En conclusion, nous avons présenté un modèle structural pour la dynamique des nanocontacts atomiques dans des chaînes atomiques déposées sur un substrat en négligeant les interactions entre le dépôt et le substrat. L'étude de ce dernier met en évidence un certain nombre de phénomènes :

- i) La diffusion dépend de la forme géométrique du nanocontact. Chaque configuration crée un certain nombre d'états localisés.
- ii) La variation des constantes de forces (d'élasticité) modifie les densités spectrales et les densités d'états (DOS).

Notre méthode peut également servir pour l'étude des chaînes granulaires construites d'une façon analogue à l'échelle macroscopique classique.

b) Cas des magnons

Les densités d'états magnoniques sont calculées numériquement pour différents sites de spins de la zone nanocontact, et sont données en unité arbitraire, en fonction de la fréquence normalisée Ω , pour les trois configurations de nanocontacts magnétiques considérées au chapitre précédent III.

Nous avons présenté les résultats sur les figures (4.4), (4.5) et (4.6). Le calcul a été fait pour trois choix de l'échange magnétique dans le domaine propre de nanocontact pour chaque configuration géométrique par rapport à la structure parfaite.

- 1) $\gamma=0.9$,
- 2) $\gamma=1.0$,
- 3) $\gamma=1.1$.

(Où le facteur $\gamma=J_d/J$, est le l'échange magnétique de la zone nanocontact divisé par celui de la zone parfaite).

Les courbes se rapportant au troisième type de nanocontact magnétique (cas de plusieurs lacunes asymétriques) présentent une richesse en pics (plus importante) que les deux autres types. Ceci est justifié, car le nombre d'états localisés dans ce dernier cas est plus grand que les deux premiers.

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

Dans le même type de configuration de nanocontact magnétique, la comparaison entre les trois courbes indiquées en légende pour chaque figure, donne une information capitale sur le décalage des positions des pics vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique (lorsque γ augmente) d'une façon claire sauf dans le cas du spin jouant le rôle de joint, on constate une faible sensibilité à la variation dans le deuxième type de nanocontact, le pic est localisé aux environs de $\Omega = 1$ pour les trois possibilités. Notons aussi que les hauteurs des pics est inversement proportionnelle au durcissement.

Cette situation confirme l'importance des états localisés du domaine nanocontact et son influence sur les spectres de DOS.

A $\Omega = 0$, les spins, se trouvant sur la même chaîne avec le spin du joint atomique, ont la même valeur de DOS dans les trois configurations de nanocontact (DOS = 0.38 unités).

L'ensemble des spins des coins présentent peu de fluctuations dans les trois configurations, et ce à cause leur confinement.

Les deux spins voisins immédiats du spin qui joue le rôle de joint, dans les trois configurations, ont un pic de grande largeur dans l'intervalle $\Omega \in [3, 7]$. Ceci s'explique par l'excitation des trois modes simultanément dans cet intervalle de fréquence.

Dans le premier et le second nanocontact, les courbes de DOS des trois spins alignés, (le joint et ses deux voisins), repasse par zéro à la même fréquence $\Omega = 3$ pour une valeur de $\gamma = 0.9$.

Pour le troisième type de nanocontact la courbe de DOS s'annule à la fréquence $\Omega = 2$.

Dans le cas du deuxième nanocontact, à $\Omega = 3$, les spins de la couche centrale présente un spectre de hauteur maximale. La même remarque est valable aussi dans le troisième nanocontact pour les spins (de la chaîne centrale) pour $\Omega = 2$.

En conclusion, dans le cas des magnons, nous avons présenté des modèles pour l'étude des spectres de DOS magnoniques des spins du domaine de nanocontact atomique. Ces derniers sont considérés comme des joints magnétiques entre deux groupes de couches de spins semi infinies, avec des interactions d'Heisenberg. Les systèmes sont soutenus par un substrat non magnétique, et considérés autrement exemptent des interactions magnétiques. Nous avons aussi étudié l'influence des intégrales d'échange sur les DOS des spins de la zone nanocontact. Le but est de connaître les conséquences d'un adoucissement et d'un durcissement sur le mouvement de précession des spins et leurs propriétés de symétrie.

Références : Chapitre IV

- [1] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323, 198 (1995)
- [2] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995)
- [3] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, J. Phys. Condens. Matter, 8, 7589 (1996)
- [4] J. Szeftel, A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987)
- [5] A. Khater, N. Auby, R.F. Wallis, Surf. Sci. 217 (1989) 563.
- [6] H. Grimech, A. Khater, Surf. Sci. 323, 191 (1995)
- [7] Y. Pennec, A. Khater, Surf. Sci. Lett. 348 (1995) L82
- [8] A. Virlovet, A. Khater, Y. Pennec, K. Maschke, J. Phys.: Cond. Matter 8 (1996) 7589
- [9] A. Virlovet, Thèse de doctorat de l'université Paris 6, France (1997)

Chapitre V

Dynamique d'une interface pointe AFM - surface

V.1. Introduction

L'un des challenges de la technologie moderne est de créer des systèmes atomiques ou moléculaires capables de transférer une information à l'échelle du manomètre. Dans ce contexte, la science des surfaces joue un rôle capital puisqu'elle permet aujourd'hui l'élaboration de nanostructures à géométrie parfaitement contrôlée.

Il a été montré récemment [1] que les surfaces vicinales favorisent la formation de fils quantiques et des nanocouches confinées entre deux marches. Outre leur capacité à générer des nanostructures, les surfaces offrent également la possibilité de travailler avec ces dernières en utilisant les propriétés des sondes locales comme le STM ou l'AFM [2]. Ces sondes peuvent jouer le rôle d'outils nanoscopiques permettant d'une part d'agir mécaniquement sur les structures adsorbées et d'autre part d'exciter sélectivement une molécule ou un atome en introduisant des transitions électroniques et/ou vibrationnelles [3].

L'utilisation de la microscopie pour réaliser une cartographie nécessite le dépôt de la pointe sur la surface du matériau. La résolution dépend de la nature et de la taille de cette pointe. Dans la pratique, cela peut entraîner une dégradation, par conséquent des modifications dans les propriétés physiques de la structure imagée. Cela est dû aux faits que, les instruments n'ont pas encore forcément atteint la précision requise pour les travaux à l'échelle nanométrique ; on peut citer, par exemple, les difficultés rencontrées dans la mesure de la force des liaisons au sein des molécules [4].

L'avènement des différents types de microscopies, a ouvert un champ considérable pour l'étude des propriétés physiques de plusieurs matériaux (optique, électronique, magnétique et autres) avec déjà un ensemble très important d'applications industrielles. Parallèlement se sont développées des technologies permettant de façonner, par modulation de la composition ou par usinage à l'échelle nanométrique, des systèmes de matériaux et, de là, d'inventer des dispositifs qui sont la clef du futur en microélectronique et en informatique.

Une question de première importance concerne la capacité des nanoobjets à transférer une information. De façon générale, cette information est véhiculée par les excitations collectives de la nanostructure.

La diffusion et le transport thermique et magnétique dans des systèmes simples, de basses dimensions en présence de nanostructures implantées, ont fait l'objet de travaux de plusieurs auteurs [5-9]. L'excitation des positions relatives des atomes d'une surface par la sonde d'un AFM et la diffusion des ondes élastiques via l'interface doivent être décrites par le formalisme de la matrice de transfert de Landauer-Buttiker [10-12].

Dans ce travail, Nous nous sommes intéressés à la diffusion d'ondes élastiques via la zone de contact entre la pointe d'un AFM et une surface d'un matériau. La dynamique de l'interface ainsi formée est décrite par mouvement des deux guides d'ondes parfaits qui se situent de part et d'autre du domaine de jonction. Le mouvement de la pointe est assimilé à celui d'une chaîne d'atomes. La dynamique vibrationnelle et la diffusion d'ondes élastiques en présence de ce type de nanocontact (interface) sont déterminées en se basant sur la méthode de raccordement [13-16]. Les effets induits par ce type de nanocontact sont discutés. Nous donnerons aussi les courbes de transmission de réflexion des phonons via l'interface pour les différentes possibilités de la position de l'atome de la pointe. La première est lorsque l'atome de la chaîne est au-dessus d'un atome de la surface, la deuxième est lorsque l'atome de la pointe est entre deux atomes (successifs) dans la même direction et la troisième correspond au cas où l'atome de la chaîne est déposé au centre de quatre atomes de la surface. Durant sa propagation, une onde élastique induit une cohérence entre les vibrations ainsi que les déplacements atomiques de la pointe AFM et ceux de la surface. Cette cohérence peut modifier localement la dynamique de l'interface à travers un couplage entre les deux états de vibrations de deux sous systèmes. Ce qui entraîne la modification des propriétés de transport vibrationnel et les modes localisés intrinsèques.

V.2. Définition d'un AFM

L'origine de la microscopie à force atomique remonte sans doute à l'invention du profilomètre à stylet par Schmaltz en 1929. Cet appareil permettait de suivre le mouvement d'une pointe qui parcourt une surface à l'aide d'un levier optique. Les déplacements de la pointe étaient enregistrés directement sur du papier photographique.

Pour améliorer cette technique, Becker introduisait en 1950 l'idée de faire osciller le stylet au contact de la surface de manière à réduire les forces latérales.

En 1982, des chercheurs du laboratoire IBM de Zürich perfectionnent le principe du Topographiner en contrôlant les vibrations qui limitaient jusque-là la résolution de l'instrument. Sur ces bases, le Microscope à Force Atomique est développé au milieu des années 80 par Gerd Binnig, Calvin Quate et Christopher Gerber. Cette fois-ci il n'y a plus de

courant tunnel mais seulement une pointe extrêmement fine à l'extrémité d'un levier. Quand la pointe entre en contact avec une surface, le levier est défléchi selon la loi de Hooke. La détection de cette déflexion s'effectuait initialement à l'aide d'une pointe STM, mais rapidement, la technique du levier optique de Schmalz fut reprise en y adjoignant l'usage d'une photodiode.

Doté d'une pointe à extrémité métallique environ de 10 [nanomètres](#) de rayon placée sur un levier flexible, l'AFM enregistre les interactions entre les [atomes](#) de la pointe et ceux de la surface à analyser. Il se produit soit une attraction, appelée force de Van der Waals, soit une répulsion (à très faible distance). Ces forces provoquent des déplacements de la pointe, entraînant des déviations du levier.

La pointe de l'AFM est tel un doigt nanométrique qui nous permet de sentir la matière à l'échelle des molécules individuelles et parfois des atomes. Cette interface est mécanique, ce qui lui confère un aspect relativement intuitif pour aborder le monde nanométrique [17].

Les pointes peuvent avoir différentes tailles et géométries, chacune ayant ses propres caractéristiques vis-à-vis du contact avec l'échantillon et de l'image qui en résulte.

Le levier possède une constante de raideur que l'on choisit en fonction de l'échantillon. Une constante de raideur basse ($< 1\text{N/m}$) permet par exemple d'exercer des forces moins importantes et donc d'éviter de détruire un échantillon fragile.

Il existe en fait trois modes d'utilisation de l'AFM : le mode contact, le mode non contact, et enfin le mode contact intermittent.

1) Le mode contact : consiste à utiliser les forces répulsives : la pointe appuie sur la surface, elle est donc repoussée du fait du principe de Pauli, et le levier est dévié. La rétroaction s'effectue sur la mesure de la direction de la déviation.

2) Le mode contact intermittent : de loin le plus utilisé, consiste à faire vibrer le levier à sa fréquence propre de résonance (typiquement de l'ordre de la centaine de kHz), avec une certaine amplitude. Quand la pointe interagit avec la surface (essentiellement de façon répulsive), l'amplitude décroît (parce que la fréquence de résonance change). La rétroaction se fait alors sur l'amplitude d'oscillation du levier [18-21].

3) Le mode non contact : utilise les forces attractives. Difficile à gérer, il est très peu utilisé en pratique, parce que ces forces sont faibles, et nécessitent un environnement à faible bruit. Par ailleurs, la couche d'adsorbats (toute surface à l'air ambiant est recouverte d'une couche de l'ordre du nm d'épaisseur d'eau et de divers polluants) vient largement affecter les mesures - le vide est plus que conseillé pour obtenir une résolution suffisante en pratique. La

rétroaction s'effectue soit sur la déviation, mais bien évidemment il s'agit d'une déviation du levier qui va dans l'autre sens que dans le cas du mode contact, soit sur l'amplitude des oscillations.

Il reste toutefois des contraintes. La profondeur de champ est limitée par le déplacement du tube du scanner, ainsi que par la taille de la pointe (la pointe ne peut pas accéder à des trous plus petits qu'elle). De ce fait, l'AFM est réservée à l'imagerie d'échantillons relativement plats. Par ailleurs, Les échantillons doivent être suffisamment solides pour résister au contact de la pointe.

V.3. Structure (géométrie) du nanocontact

Le domaine du nanocontact est décrit comme une interface entre deux sous structures parfaites. Il est engendré par le contact pointe d'un AFM - surface plane d'un matériau. La pointe est modélisée par une chaîne atomique.

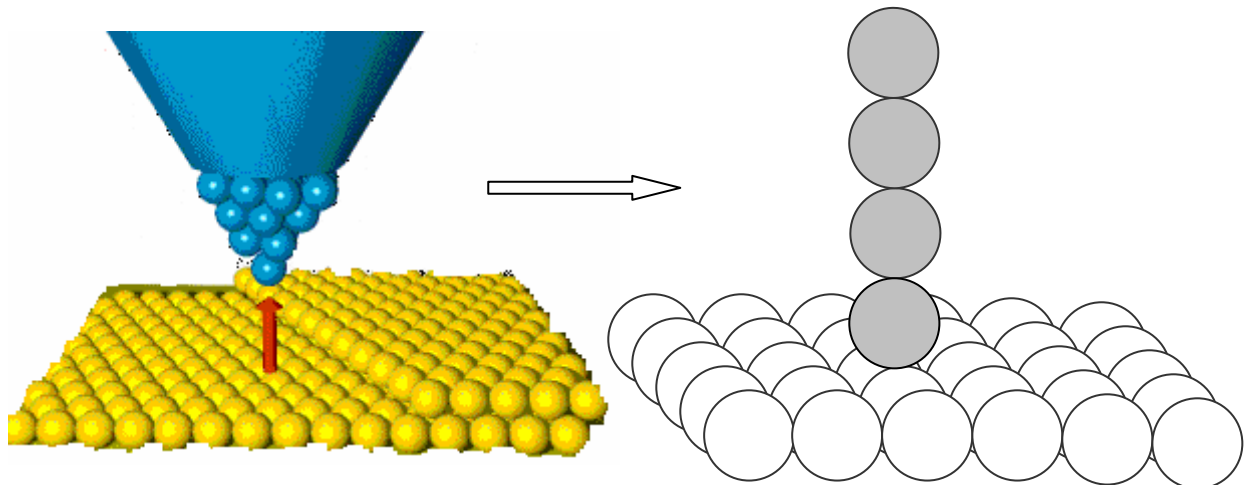


Figure (5.1) : Représentation schématique d'une interface pointe AFM- surface.

Pourtant, même dans ce cas, il reste que la hauteur mesurée par l'AFM reflète aussi bien la topographie que le changement d'interaction entre la pointe et l'échantillon. De ce point de vue, il peut subsister, pour des objets qui interagissent avec la pointe différemment du reste de la surface, de légères différences entre les hauteurs apparentes et les hauteurs réelles.

V.4. Propriétés vibrationnelles

En se basant sur la méthode de raccordement, décrite dans cette thèse, nous abordons la diffusion d'ondes élastiques via l'interface (traitée comme un nanocontact). L'objectif est d'élucider les mécanismes de transport de phonons et de connaître l'influence de la position de la pointe sur la dynamique et les propriétés vibrationnelles.

V.4. a) Dynamique des deux systèmes loin du domaine nanocontact

En utilisant l'équation (1. 5), nous établissons facilement les équations de mouvement des atomes des deux sous-systèmes parfaits utilisés pour la modélisation.

Nous limitons notre étude aux interactions entre premiers et seconds voisins. Nous obtenons alors les matrices dynamiques D_{v1} et D_{v2} , correspondant respectivement aux guides d'ondes parfaits de la surface et chaîne atomique, comme le montre le système d'équations suivant :

$$[\Omega^2 I - D_{v1}(z_1, z_2, k_1, \epsilon_2)] |u\rangle = |0\rangle \dots \dots \dots (5. 1a)$$

$$[\Omega^2 I - D_{v2}(z_1, k_1)] |u\rangle = |0\rangle \dots \dots \dots (5. 1b)$$

Où : D_{v1} est la matrice dynamique de la surface plane, D_{v2} est la matrice dynamique de la chaîne atomique parfaite, et $|u\rangle$ est le vecteur propre. $\Omega = \frac{m\omega^2}{k_1}$ Est la fréquence normalisée.

z_1 : est le facteur de phase suivant la direction (x), $z_1 = e^{j\phi_x}$, le facteur de phase suivant (oy) est noté $z_2 = e^{j\phi_y}$ où $\phi_y = aq_y$, et k_1 et k_2 sont respectivement les constantes de forces entre premiers et seconds voisins de la première structure. k'_1 est la constante de force de la chaîne atomique.

La résolution du problème aux valeurs propres issue de l'équation (5. 1), donne les différents modes d'énergies Ω_v des deux structures parfaites. On obtient les relations de dispersion représentées sur la figure (5.2) pour les différents modes propres, pour une valeur de $k_2/k_1 = 0.5$.

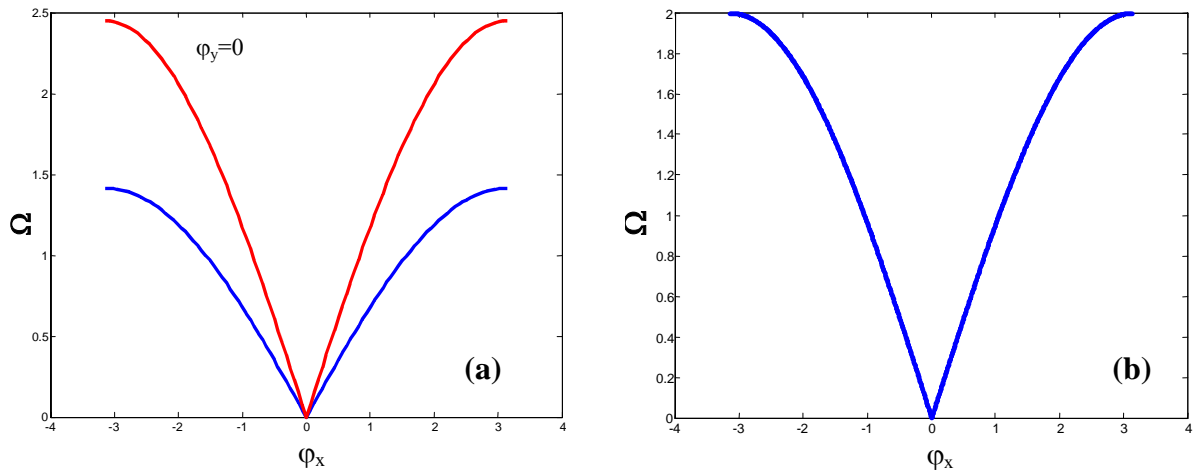


Figure (5.2) : Courbes de dispersion de :
 (a) une surface plane (b) une chaîne linéaire.

V.4. b) Etude de la diffusion via l'interface

Nous voulons savoir comment une interface, formée de la jonction entre deux sous systèmes, diffuse-t-elle les ondes élastiques ?

Nous suivons une procédure identique à celle utiliser dans les chapitres précédents.

Nous analyserons trois possibilités de la position de la pointe sur la surface :

- (1) l'atome du la pointe est placé au-dessus d'un atome de la surface,
- (2) l'atome du la pointe est positionné entre deux atomes successifs de la surface,
- (3) l'atome du la pointe est positionné au centre de quatre atomes de la surface.

Les géométries des nanocontacts qui résultent de la jonction des sous structures, l'allure des coefficients de réflexion et de transmission des phonons dans les trois possibilités de placement de la pointe est donnée sur les figures ci-après. De plus, pour la même configuration géométrique de la position de la pointe, nous avons examiné trois possibilités de l'environnement, à savoir : adoucissement, homogénéité et durcissement des constantes élastiques entre les deux sous-systèmes parfaits.

Nous traitons tout d'abord le cas où les masses des deux sous systèmes qui se situent de part et d'autre de l'interface sont proches ($m' \approx m$), puis à la fin nous relevons l'influence des masses lorsque ces dernières sont totalement différentes.

V.4.b.1. La pointe est au dessus d'un atome de la surface

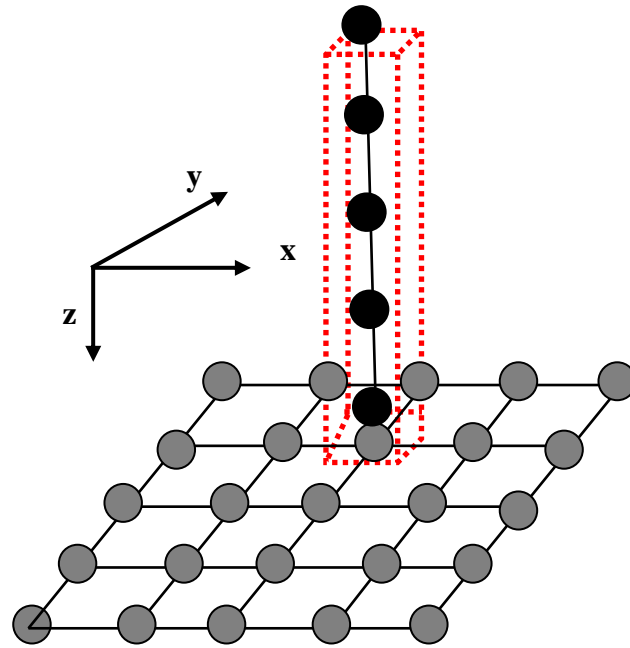


Fig.5.3a : L'atome de la pointe est au-dessus d'un atome du plan.

a. Matrice dynamique du système

La matrice dynamique D du système est obtenue en écrivant les équations du mouvement des atomes de la zone de jonction plus celles des atomes de raccordement de la surface (dans les quatre directions) et celle de l'atome de la chaîne (D est rectangulaire de taille (27×36)).

Atome (0,0,2) : $\{[m'\omega^2 - k'_2]U_z(002) + [k'_1]U_z(001) + [k'_1]U_z(003) = 0$

Atome (0,0,1)

$$\{[m'\omega^2 - k'_2]U_x(001) + [k'_2/2]U_x(100) + [k'_2/2]U_x(\bar{1}00) - [k'_2/2]U_x(100) + [k'_2/2]U_x(\bar{1}00) = 0$$

$$\{[m'\omega^2 - k'_2]U_y(001) + [k'_2/2]U_y(010) + [k'_2/2]U_y(0\bar{1}0) - [k'_2/2]U_y(010) + [k'_2/2]U_y(0\bar{1}0) = 0$$

$$\left\{ \begin{aligned} & [m'\omega^2 - 2k'_1 - 2k'_2]U_z(001) + [k'_1]U_z(002) + [k'_1]U_z(000) + [k'_2/2]U_z(\bar{1}00) + [k'_2/2]U_z(100) + [k'_2/2]U_z(0\bar{1}0) \\ & + [k'_2/2]U_z(010) - [k'_2/2]U_x(100) + [k'_2/2]U_x(\bar{1}00) - [k'_2/2]U_y(010) + [k'_2/2]U_y(0\bar{1}0) = 0 \end{aligned} \right.$$

Atome (0,0,0)

$$\{[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_x(000) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(010) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) = 0$$

$$\{[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_y(000) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(100) + [k_2]U_y(\bar{1}00) = 0$$

$$\{[m\omega^2 - k_1]U_z(000) + [k_1]U_z(001) = 0$$

Atome (1,0,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 5k_2/2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(200) + [k_1]U_x(000) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) + [k_2]U_x(010) \\ \quad + [k_2/2]U_x(001) - [k_2/2]U_z(001) + [k_2/2]U_z(100) = 0 \\ [m\omega^2 - 2k_2]U_y(100) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(020) = 0 \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(100) + [k_2/2]U_z(001) - [k_2/2]U_x(001) + [k_2/2]U_x(100) = 0 \end{cases}$$

Atome (-1,0,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 5k_2/2]U_x(\bar{1}00) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{2}00) + [k_1]U_x(000) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) + [k_2]U_x(010) \\ \quad + [k_2/2]U_x(001) + [k_2/2]U_z(001) - [k_2/2]U_z(\bar{1}00) = 0 \\ [m\omega^2 - 2k_2]U_y(\bar{1}00) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(0\bar{2}0) = 0 \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(\bar{1}00) + [k_2/2]U_z(001) + [k_2/2]U_x(001) - [k_2/2]U_x(\bar{1}00) = 0 \end{cases}$$

Atome (2,0,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_x(200) + [k_1 + k_2]U_x(300) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_2]U_x(010) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) = 0 \\ [m\omega^2 - 2k_2]U_y(200) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(100) + [k_2]U_y(300) = 0 \end{cases}$$

Atome (-2,0,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_x(\bar{2}00) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{3}00) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(010) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) = 0 \\ [m\omega^2 - 2k_2]U_y(\bar{2}00) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(\bar{1}00) + [k_2]U_y(\bar{3}00) = 0 \end{cases}$$

Atome (0,1,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_2]U_x(010) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(020) = 0 \\ \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 5k_2/2]U_y(010) + [k_1 + k_2]U_y(020) + [k_1]U_y(000) + [k_2]U_y(\bar{1}00) + [k_2]U_y(100) \\ \quad + [k_2/2]U_y(001) - [k_2/2]U_z(001) + [k_2/2]U_z(010) = 0 \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(010) + [k_2/2]U_z(001) - [k_2/2]U_y(001) + [k_2/2]U_y(010) = 0 \end{cases}$$

Atome (0,-1,0)

$$\begin{cases} \{ [m\omega^2 - 2k_2]U_x(0\bar{1}0) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(0\bar{2}0) = 0 \\ \{ [m\omega^2 - 2k_1 - 5k_2/2]U_y(0\bar{1}0) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{2}0) + [k_1]U_y(000) + [k_2]U_y(\bar{1}00) + [k_2]U_y(100) \\ \quad + [k_2/2]U_y(001) + [k_2/2]U_z(001) - [k_2/2]U_z(0\bar{1}0) = 0 \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(0\bar{1}0) + [k_2/2]U_z(001) + [k_2/2]U_y(001) - [k_2/2]U_y(0\bar{1}0) = 0 \end{cases}$$

Atome (0,2,0)

$$\{ [m\omega^2 - 2k_2]U_x(020) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(030) + [k_2]U_x(010) = 0$$

$$\{[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_y(020) + [k_1 + k_2]U_y(030) + [k_1 + k_2]U_y(010) + [k_2]U_y(100) + [k_2]U_y(\bar{1}00) = 0$$

Atome (0,-2,0)

$$\{[m\omega^2 - 2k_2]U_x(0\bar{2}0) + [k_1 + k_2]U_x(100) + [k_1 + k_2]U_x(\bar{1}00) + [k_2]U_x(0\bar{3}0) + [k_2]U_x(0\bar{1}0) = 0$$

$$\{[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_y(0\bar{2}0) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{3}0) + [k_1 + k_2]U_y(0\bar{1}0) + [k_2]U_y(100) + [k_2]U_y(\bar{1}00) = 0$$

Le produit de la matrice D obtenue avec la matrice de raccordement du système R donne une matrice carrée $S(27 \times 27)$. Qui donne les états vibrationnels de l'interface. Ils sont déterminés par la relation de compatibilité :

$$\det([S(27 \times 27)]) = 0 \dots\dots\dots(5.2)$$

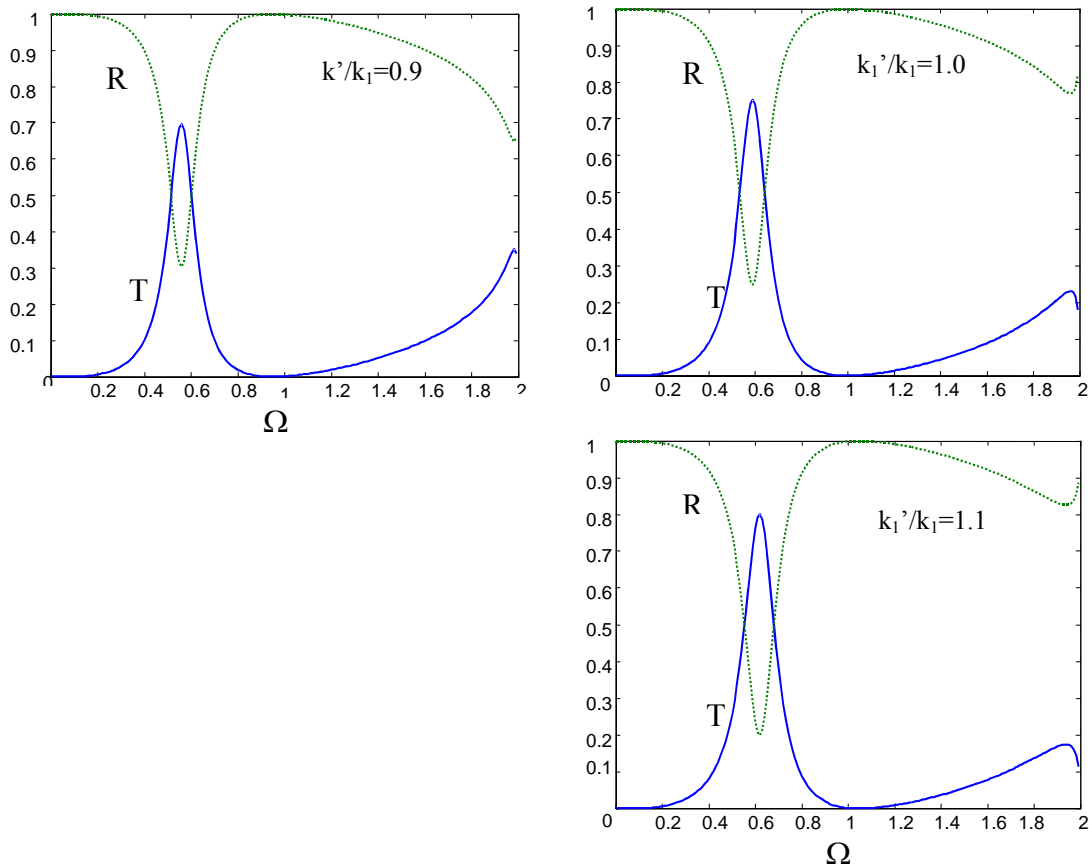


Fig.5.3b : Coefficients de transmission et de réflexion en fonction de Ω dans la première interface

V.4.b.2. La pointe est entre deux atomes successifs

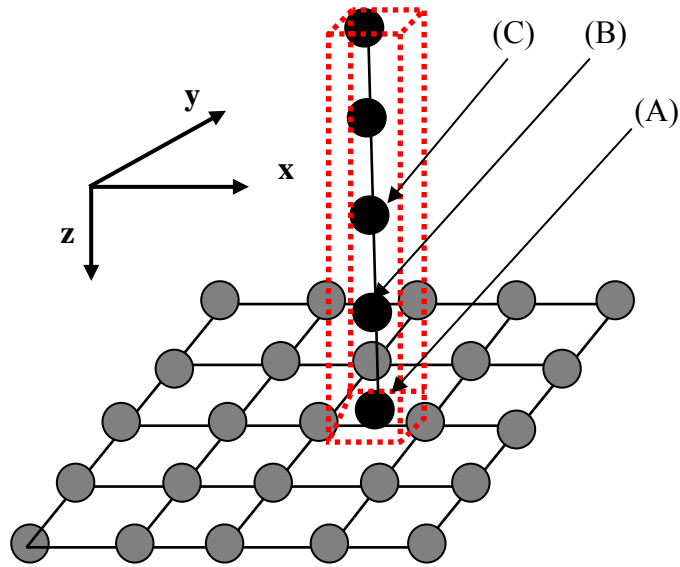


Fig.5.4a : Interface 2 : l'atome de la chaîne est placé entre deux atomes successifs du plan.

a. Matrice dynamique du système

La matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement des atomes de la zone de jonction plus celles des atomes de raccordement de la surface (dans la direction ox) et celle de l'atome de la chaîne, on obtient une matrice rectangulaire $D(14 \times 19)$ (appelée matrice dynamique du système en présence de l'interface).

Atome (1,0,0) :

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.r - k/5]U_x(100) + [k_1 + r.\cos(\varphi)]U_x(20) + [k_1 + r.\cos(\varphi)]U_x(\bar{1}00) + [k/5]U_x(000) \\ + [r.i.\sin(\varphi)]U_y(20) - [r.i.\sin(\varphi)]U_y(\bar{1}00) + [2.k/5]U_z(000) - [2.k/5]U_z(100) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.r + 2.k_1.\cos(\varphi)]U_y(100) + [r.\cos(\varphi)]U_y(20) + [r.\cos(\varphi)]U_y(\bar{1}00) \\ + [r.i.\sin(\varphi)]U_x(20) - [r.i.\sin(\varphi)]U_x(\bar{1}00) = 0 \end{cases}$$

$$\{ [m\omega^2 - 4.k/5]U_z(100) + [4k/5]U_z(000) + [2k/5]U_x(000) - [2k/5]U_x(100) = 0$$

Atome (-1,0,0) :

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.r - k/5]U_x(\bar{1}00) + [k_1 + r.\cos(\varphi)]U_x(\bar{2}0) + [k_1 + r.\cos(\varphi)]U_x(100) + [k/5]U_x(000) \\ - [r.i.\sin(\varphi)]U_y(\bar{2}0) + [r.i.\sin(\varphi)]U_y(100) - [2.k/5]U_z(000) + [2.k/5]U_z(\bar{1}00) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.r + 2.k_1.\cos(\varphi)]U_y(\bar{1}00) + [r.\cos(\varphi)]U_y(\bar{2}0) + [r.\cos(\varphi)]U_y(100) \\ - [r.i.\sin(\varphi)]U_x(\bar{2}0) + [r.i.\sin(\varphi)]U_x(100) = 0 \end{cases}$$

$$\{m\omega^2 - 4k/5]U_z(\bar{1}00) + [4k/5]U_z(000) - [2k/5]U_x(000) + [2k/5]U_x(\bar{1}00) = 0$$

Atome (0,0,0) :

$$\{m\omega^2 - 2k/5]U_x(000) + [k/5]U_x(100) + [k/5]U_x(\bar{1}00) + [2k/5]U_z(100) - [2k/5]U_z(\bar{1}00) = 0$$

$$\{[m\omega^2 - 0]U_y(000) = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_1 - 8k/5]U_z(\bar{1}00) + [k_1]U_z(00\bar{1}) + [4k/5]U_z(100) + [4k/5]U_z(\bar{1}00) \\ - [2k/5]U_x(\bar{1}00) + [2k/5]U_x(100) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (A) :

$$\{[m\omega^2 - 2k_1]U_z(A) + [k_1]U_z(000) + [k_1]U_z(B) = 0$$

Atome (2,0,0) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2r]U_x(200) + [k_1 + r \cos(\varphi)]U_x(300) + [k_1 + r \cos(\varphi)]U_x(100) \\ - [r \cdot i \sin(\varphi)]U_y(100) + [r \cdot i \sin(\varphi)]U_y(300) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2r + 2k_1 \cos(\varphi)]U_y(200) + [r \cos(\varphi)]U_y(300) + [r \cos(\varphi)]U_y(100) \\ - [r \cdot i \sin(\varphi)]U_x(100) + [r \cdot i \sin(\varphi)]U_x(300) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (-2,0,0) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2r]U_x(\bar{2}00) + [k_1 + r \cos(\varphi)]U_x(\bar{3}00) + [k_1 + r \cos(\varphi)]U_x(\bar{1}00) \\ + [r \cdot i \sin(\varphi)]U_y(\bar{1}00) - [r \cdot i \sin(\varphi)]U_y(\bar{3}00) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2r + 2k_1 \cos(\varphi)]U_y(\bar{2}00) + [r \cos(\varphi)]U_y(\bar{3}00) + [r \cos(\varphi)]U_y(\bar{1}00) \\ + [r \cdot i \sin(\varphi)]U_x(\bar{1}00) - [r \cdot i \sin(\varphi)]U_x(\bar{3}00) = 0 \end{array} \right.$$

Le produit de la matrice D obtenue avec la matrice de raccordement du système R donne une matrice carrée $S(14 \otimes 14)$. Les états vibrationnels induits par l'existence de la nanostructure sont déterminés par la relation de compatibilité.

Les courbes des coefficients de transmission et de réflexion via l'interface 2 dans le cas considéré sont représentées sur la figure suivante :

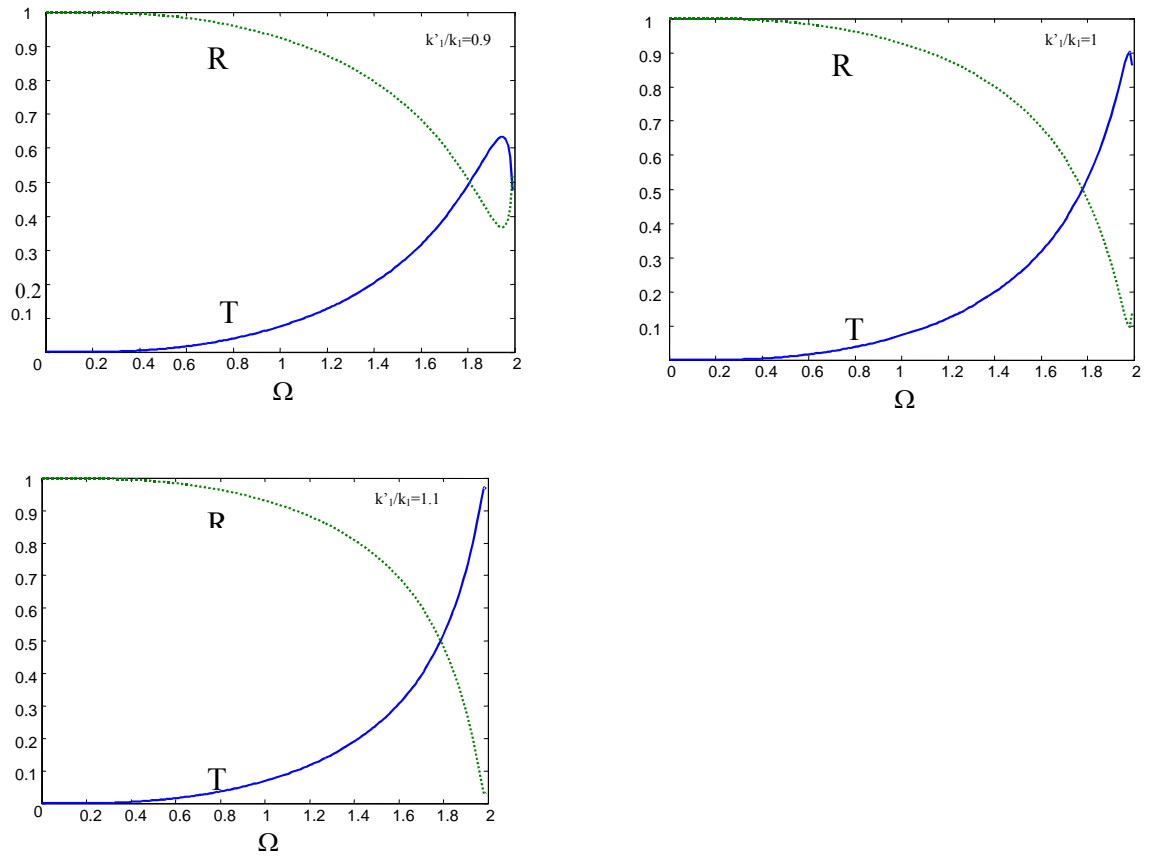


Fig.5.4b : Coefficients de transmission et de réflexion en fonction Ω .
Pour la deuxième configuration d'interface.

V.4.b.3. La pointe est au centre de quatre atomes

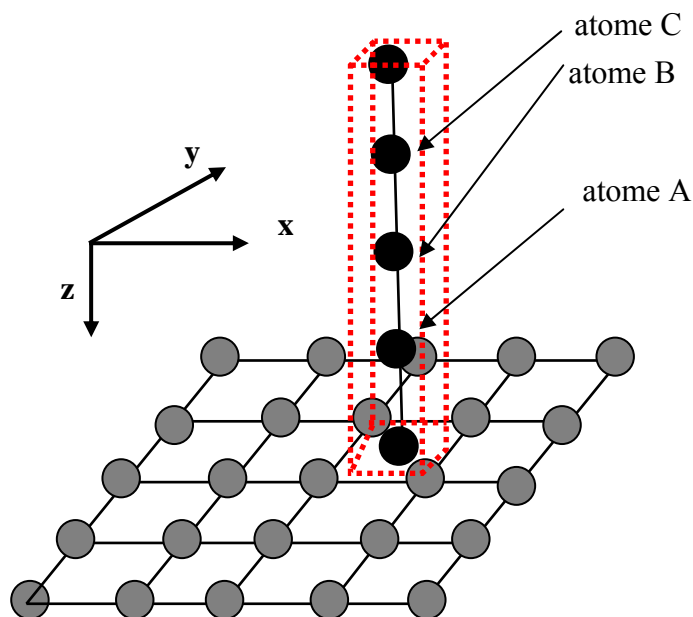


Fig.5.5a : Interface 3 : l'atome de la chaîne est placé au centre de quatre atomes du plan.

a. Matrice dynamique du système

La matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement des atomes de la zone de jonction plus celles des atomes de raccordement de la surface (dans la direction ox) et celle de l'atome de la chaîne, on obtient une matrice rectangulaire $D(24 \times 33)$ (appelée matrice dynamique du système perturbé).

Atome (B) : $\{m\omega^2 - 2k_1\}U_z(B) + [k_1']U_z(A) + [k_1']U_z(C) = 0$

Atome (A) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_2]U_x(A) + [k_2/4]U_x(110) + [k_2/4]U_x(100) + [k_2/4]U_x(010) + [k_2/4]U_x(000) \\ + [k_2/4]U_y(110) - [k_2/4]U_y(100) + [k_2/4]U_y(000) - [k_2/2]U_y(010) + \\ [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(110) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(100) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(010) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(000) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_2]U_y(A) + [k_2/4]U_y(110) + [k_2/4]U_y(100) + [k_2/4]U_y(010) + [k_2/4]U_y(000) \\ + [k_2/4]U_x(110) - [k_2/4]U_x(100) + [k_2/4]U_x(000) - [k_2/2]U_x(010) + \\ [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(110) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(100) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(010) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(000) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_1 - 2k_2]U_z(A) + [k_1]U_z(B) + [k_2/2]U_z(110) + [k_2/2]U_z(100) + [k_2/2]U_z(010) + [k_2/2]U_z(000) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_x(110) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_x(100) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_x(010) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_x(000) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_y(110) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_y(100) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_y(010) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_y(000) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (0,0,0) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4]U_x(000) + [1 + \frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(100) + [1 + \frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(\bar{1}00) + [k_2/2]U_x(110) + [k_2/2]U_x(\bar{1}\bar{1}0) + \\ [k_2/4]U_x(A) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(\bar{1}00) - [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(100) + [k_2/2]U_y(110) - [k_2/2]U_y(\bar{1}\bar{1}0) + [k_2/4]U_y(A) - [k_2/4]U_y(000) \\ - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(000) = 0 \\ \\ [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4 + k_1 e^{-i\phi}]U_y(000) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(100) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(\bar{1}00) + [k_2/2]U_y(110) + [k_2/2]U_y(\bar{1}\bar{1}0) + [k_1]U_y(010) \\ [k_2/4]U_y(A) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(\bar{1}00) - [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(100) + [k_2/2]U_x(110) - [k_2/2]U_x(\bar{1}\bar{1}0) + [k_2/4]U_x(A) - [k_2/4]U_x(000) \\ - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(000) = 0 \\ \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(000) + [k_2/2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(000) \\ - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(000) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (0,1,0) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4]U_x(010) + [1 + \frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_x(110) + [1 + \frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_x(\bar{1}\bar{1}0) + [k_2/2]U_x(100) + [k_2/2]U_x(\bar{1}00) + \\ [k_2/4]U_x(A) + [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_y(110) - [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_y(\bar{1}\bar{1}0) + [k_2/2]U_y(\bar{1}00) - [k_2/2]U_y(100) - [k_2/4]U_y(A) + [k_2/4]U_y(010) \\ - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(010) = 0 \\ \\ [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4 + k_1 e^{i\phi}]U_y(010) + [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_y(110) + [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_y(\bar{1}\bar{1}0) + [k_2/2]U_y(100) + [k_2/2]U_y(\bar{1}00) + [k_1]U_y(000) \\ [k_2/4]U_y(A) - [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_x(\bar{1}\bar{1}0) + [\frac{k_2 e^{i\phi}}{2}]U_x(110) - [k_2/2]U_x(100) + [k_2/2]U_x(\bar{1}00) - [k_2/4]U_x(A) + [k_2/4]U_x(010) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(010) = 0 \\ \\ [m\omega^2 - k_2/2]U_z(010) + [k_2/2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(010) \\ - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(010) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (2,0) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.k_2]U_x(20) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{-i\phi}]U_x(30) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{-i\phi}]U_x(100) + [k_2/2]U_x(31) + [k_2/2]U_x(110) \\ + [k_2/2]U_y(31) - [k_2/2]U_y(110) - [\frac{k_2}{2}.e^{-i\phi}]U_y(30) + [\frac{k_2}{2}.e^{-i\phi}]U_y(100) = 0 \\ \\ [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.k_2 + 2.k_1 e^{-i\phi}]U_y(20) + [k_1]U_y(21) + [k_2/2]U_y(31) + [k_2/2]U_y(110) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(100) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_y(30) \\ + [k_2/2]U_x(31) - [k_2/2]U_x(110) + [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(100) - [\frac{k_2 e^{-i\phi}}{2}]U_x(30) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (2,1) :

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.k_2]U_x(21) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{i\phi}]U_x(31) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{i\phi}]U_x(110) + [k_2/2]U_x(30) + [k_2/2]U_x(100) \\ - [k_2/2]U_y(30) + [k_2/2]U_y(100) + [\frac{k_2}{2}.e^{i\phi}]U_y(31) - [\frac{k_2}{2}.e^{i\phi}]U_y(110) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + 2e^{i\varphi}]U_y(21) + [k_1]U_y(20) + [k_2/2]U_y(30) + [k_2/2]U_y(100) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(110) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(31) \\ - [k_2/2]U_x(30) + [k_2/2]U_x(100) - [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(110) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(31) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (1,0,0)

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4]U_x(100) + [1 + \frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(000) + [1 + \frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(20) + [k_2/2]U_x(010) + [k_2/2]U_x(21) + \\ [k_2/4]U_x(A) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(000) - [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(20) + [k_2/2]U_y(21) - [k_2/2]U_y(010) - [k_2/4]U_y(A) + [k_2/4]U_y(100) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(100) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4 + k_1 e^{-i\varphi}]U_y(100) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(20) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(000) + [k_2/2]U_y(010) + [k_2/2]U_y(21) + [k_1]U_y(110) \\ [k_2/4]U_y(A) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(000) - [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(20) + [k_2/2]U_x(21) - [k_2/2]U_x(010) - [k_2/4]U_x(A) + [k_2/4]U_x(100) \\ - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(100) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_2/2]U_z(100) + [k_2/2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(A) - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(100) \\ - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(100) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (1,1,0)

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4]U_x(110) + [1 + \frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(21) + [1 + \frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(010) + [k_2/2]U_x(000) + [k_2/2]U_x(20) + \\ [k_2/4]U_x(A) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(21) - [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(010) + [k_2/2]U_y(000) - [k_2/2]U_y(20) + [k_2/4]U_y(A) - [k_2/4]U_y(110) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(110) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 - k_2/4 + k_1 e^{i\varphi}]U_y(110) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(21) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_y(010) + [k_2/2]U_y(20) + [k_2/2]U_y(000) + [k_1]U_y(100) \\ + [k_2/4]U_y(A) + [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(21) - [\frac{k_2 e^{i\varphi}}{2}]U_x(010) - [k_2/2]U_x(20) + [k_2/2]U_x(000) + [k_2/4]U_x(A) - [k_2/4]U_x(110) \\ + [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(A) - [\frac{\sqrt{2}}{4}k_2]U_z(110) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - k_2/2]U_z(110) + [k_2/2]U_z(A) + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(A) - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_x(110) \\ + [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(A) - [\frac{\sqrt{2}k_2}{4}]U_y(110) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (-1,0)

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2]U_x(\bar{1}0) + [k_1 + \frac{k_2}{2}e^{-i\varphi}]U_x(000) + [k_1 + \frac{k_2}{2}e^{-i\varphi}]U_x(\bar{2}0) + [k_2/2]U_x(\bar{2}1) + [k_2/2]U_x(010) \\ - [k_2/2]U_y(\bar{2}1) + [k_2/2]U_y(010) - [\frac{k_2}{2}e^{-i\varphi}]U_y(000) + [\frac{k_2}{2}e^{-i\varphi}]U_y(\bar{2}0) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + 2k_1 e^{-i\varphi}]U_y(\bar{1}0) + [k_1]U_y(\bar{1}1) + [k_2/2]U_y(\bar{2}1) + [k_2/2]U_y(010) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(010) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_y(\bar{2}0) \\ + [k_2/2]U_x(010) - [k_2/2]U_x(\bar{2}1) - [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(000) + [\frac{k_2 e^{-i\varphi}}{2}]U_x(\bar{2}0) = 0 \end{array} \right.$$

Atome (-1,1)

$$\left\{ \begin{aligned} & [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.k_2]U_x(\bar{11}) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{i\varphi}]U_x(010) + [k_1 + \frac{k_2}{2}.e^{i\varphi}]U_x(\bar{21}) + [k_2/2]U_x(\bar{20}) + [k_2/2]U_x(000) \\ & + [k_2/2]U_y(\bar{20}) - [k_2/2]U_y(000) + [\frac{k_2}{2}.e^{i\varphi}]U_y(010) - [\frac{k_2}{2}.e^{i\varphi}]U_y(\bar{21}) = 0 \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} & [m\omega^2 - 2.k_1 - 2.k_2 + 2.k_1.e^{i\varphi}]U_y(\bar{11}) + [k_1]U_y(\bar{10}) + [k_2/2]U_y(\bar{20}) + [k_2/2]U_y(000) + [\frac{k_2.e^{i\varphi}}{2}]U_y(010) + [\frac{k_2.e^{i\varphi}}{2}]U_y(\bar{21}) \\ & + [k_2/2]U_x(\bar{20}) - [k_2/2]U_x(000) - [\frac{k_2.e^{i\varphi}}{2}]U_x(\bar{21}) + [\frac{k_2.e^{i\varphi}}{2}]U_x(010) = 0 \end{aligned} \right.$$

En multipliant la matrice D par la matrice de raccordement R, permet d'avoir une matrice carrée qui donne accès aux coefficients de transmission et de réflexion via l'interface. Ils sont représentés sur la figure suivante :

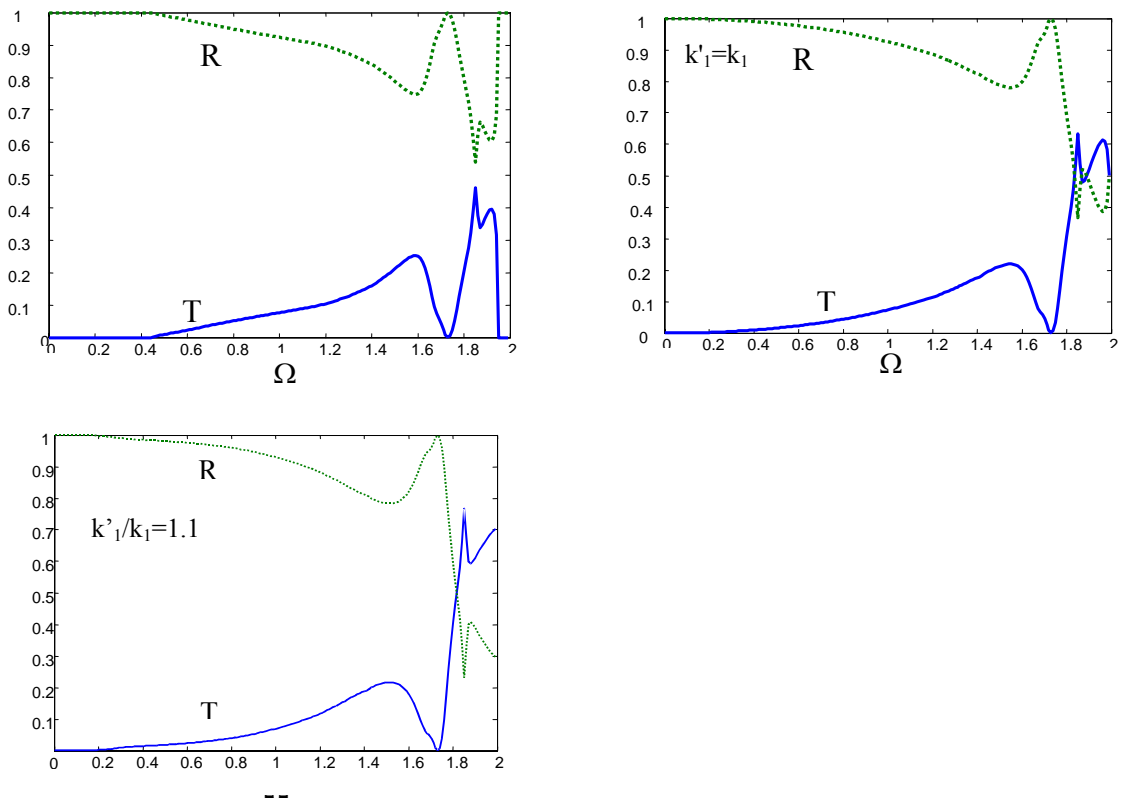
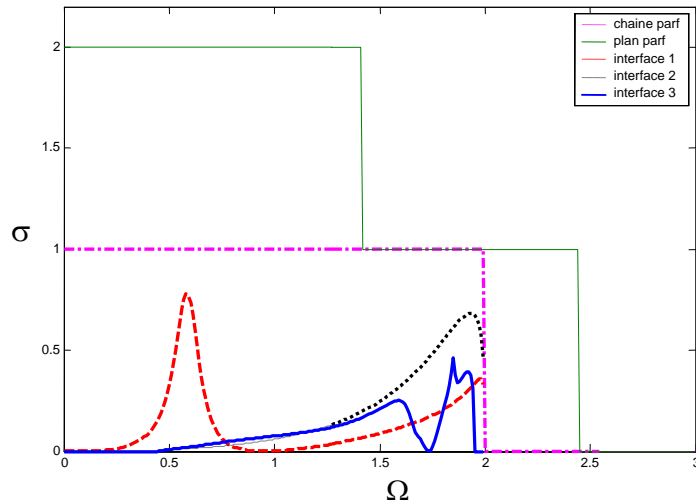


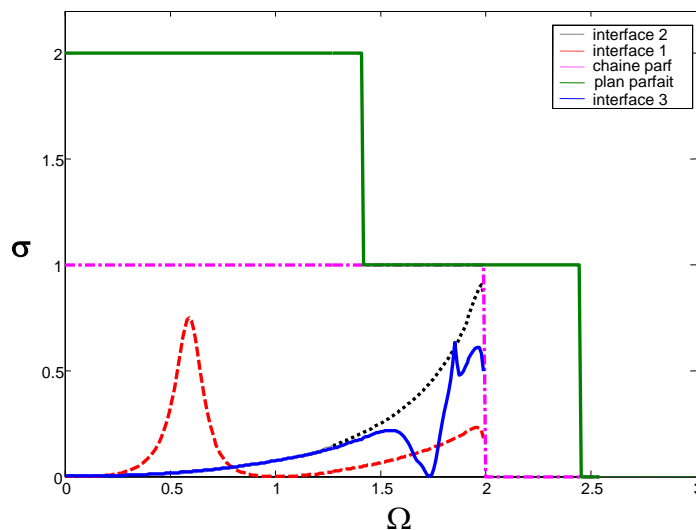
Fig.5.5b : Coefficients de transmission et de réflexion de l'interface 3, en fonction de Ω .

V.4.c. Conductance des phonons

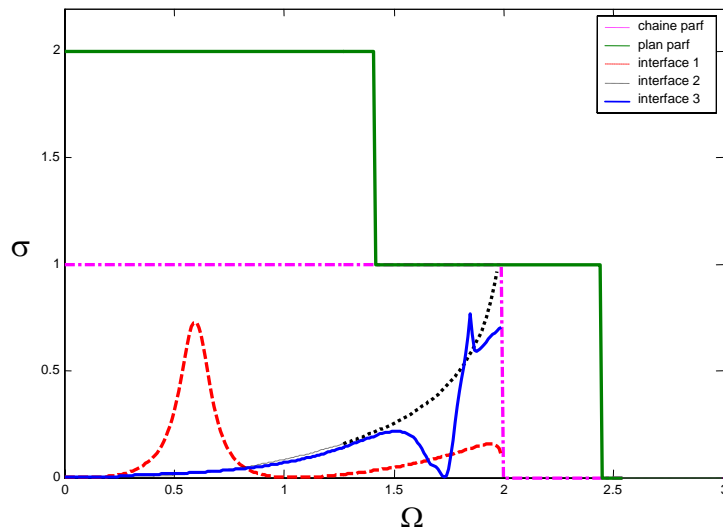
1) Nous représentons, sur la figure (5.6), les courbes de conductance pour les trois configurations de nanocontacts (les trois interfaces) et pour les trois possibilités des constantes élastiques des deux sous-systèmes formant l'interface. Nous avons représenté également celles des deux systèmes parfaits.



Cas (a)



Cas (b)

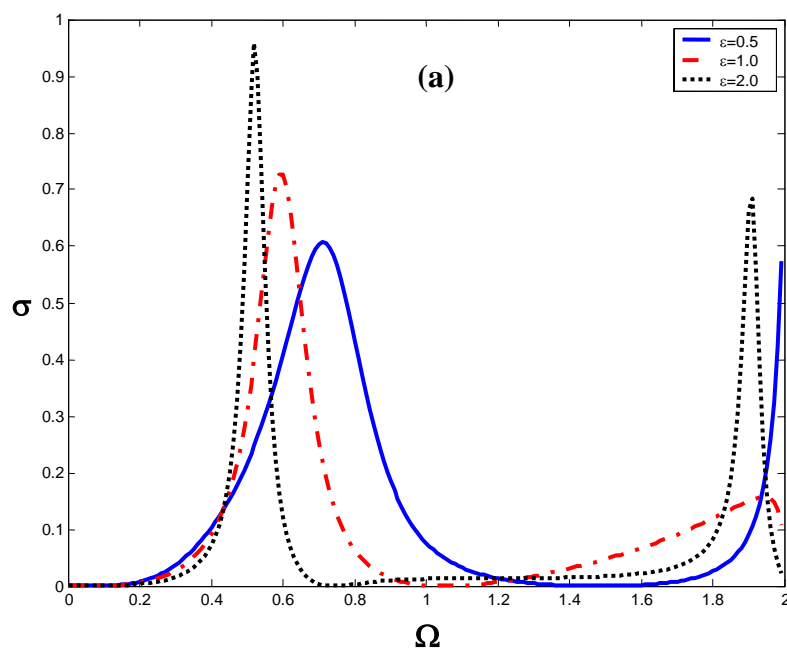


Cas (c)

Fig.5.6 : Conductance des phonons via les trois formes d'interface.

- (a) : cas d'un adoucissement des constantes élastiques,
- (b) : cas où les constantes élastiques sont identiques,
- (c) : cas d'un durcissement des constantes élastiques.

2) Dans la pratique les atomes de la pointe sont de nature différente que ceux de la surface, nous donnons les courbes de conductances pour les trois possibilités de placement de la pointe en tenant compte des différences dans les masses des deux sous systèmes formant le nanocontact et ce en fonction du coefficient $\varepsilon = m'/m$.



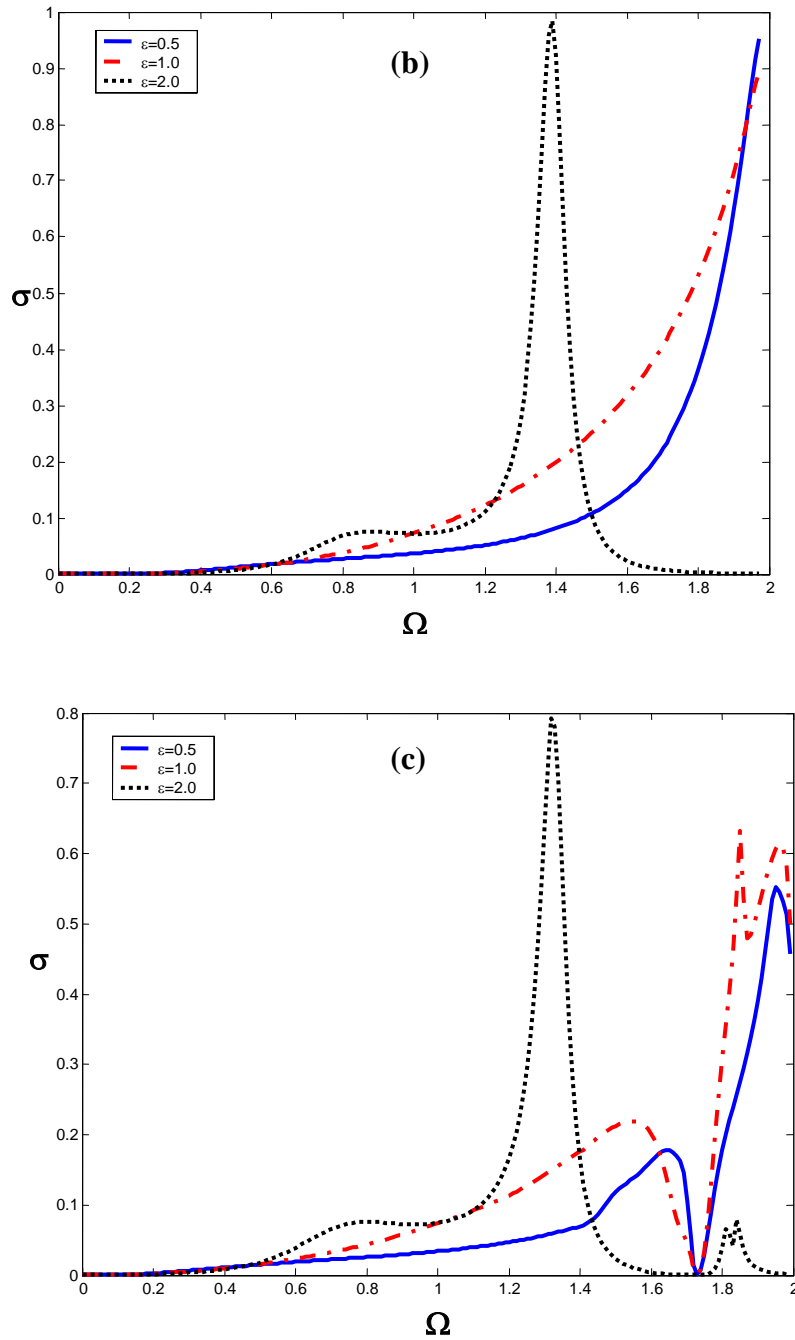


Fig.5.7 : Conductance des phonons en fonction de la fréquence normalisée en tenant compte des différences des masses entre les deux sous systèmes.

- (a) premier type d'interface,
- (b) deuxième type d'interface,
- (c) troisième type d'interface.

Discussion des résultats

Dans ce chapitre, nous avons présenté quelques résultats de diffusion d'une onde incidente se propageant selon un mode propre i (soit $|z(i)|=1$), depuis la pointe d'un AFM (assimilée dans ce travail à une chaîne d'atomes) vers une surface d'un matériau (structure plane) par l'intermédiaire d'une interface. La zone de jonction entre les deux sous groupes de structures peut être décrite comme un nanocontact atomique.

Sur les figures (5.2a, 5.2b), nous avons tracé les courbes de dispersion, des deux systèmes parfaits utilisés pour la modélisation du nanocontact, dans la première zone de Brillouin.

Pour la surface (fig.5.2a), les deux modes sont acoustiques (tendent vers zéro, lorsque ϕ_x tend vers zéro). Leurs intervalles de propagation sont respectivement :

Mode 1 : $\Omega \in [0, \Omega_{\max}=1.45]$,

Mode 2 : $\Omega \in [0, \Omega_{\max}=2.40]$, (la numérotation des modes se fait du bas en haut).

Pour la chaîne son mode se propage dans l'intervalle de fréquence $[0, \Omega_{\max}=2]$.

Le calcul numérique peut être fait pour une large variété de valeurs des différents paramètres des deux sous systèmes, et pour les différentes possibilités de placement de la pointe (d'un AFM) sur la surface.

Dans le domaine de jonction, on distingue trois possibilités de placement de l'atome de la pointe pour le balayage de la surface.

Dans la première configuration géométrique de l'interface schématisée sur la figure (5.3a), la pointe atomique est placée au dessus d'un atome de la surface, dans la deuxième figure (5.4a), l'interface est produite par une position de la chaîne entre deux atomes successifs dans le plan atomique et en dernier le nanocontact de la figure (5.5a), la pointe est posée au centre de quatre atomes.

Sur les figures (5.3b), (5.4b) et (5.5b) nous avons représenté les courbes de transmission et de réflexion des ondes élastiques se propageant de la pointe vers la surface, en fonction de la fréquence normalisée Ω . Les deux coefficients sont indiqués sur chaque figure.

Pour chaque position probable de l'atome de la pointe, nous avons analysé trois possibilités différentes en ce qui concerne les constantes élastiques interatomiques des deux sous groupes de structures engendrant le nanocontact (la zone d'interface).

- (i) lorsque les constantes de force de la chaîne sont inférieures à celles de la surface.
- (ii) lorsque les constantes de force sont homogènes dans les deux sous-systèmes.
- (iii) lorsque les constantes de force de la chaîne sont supérieures à celles de la surface.

Il y a des caractéristiques générales qui sont communes aux trois configurations et un certain comportement spécifique de chaque nanocontact. Ceci illustre comment la géométrie de l'interface influence-t-elle la propagation des ondes élastiques.

Parmi les propriétés communes des courbes des trois possibilités de placement de la pointe, on cite la somme des deux coefficients de transmission et de réflexion qui est égale à l'unité ($T+R=1$). D'ailleurs, cette propriété a été utilisée comme test pour nos calculs numériques.

Nous constatons aussi que le coefficient de transmission (T) commence dans tout les cas par une valeur nulle. Cette caractéristique est commune pour les trois configurations d'interface.

Mais il existe des différences de taille entre les trois interfaces qu'on va énumérer :

a) Dans le premier emplacement :

Sur la figure (5.3b), pour les trois possibilités des constantes élastiques, la transmission présente un pic important aux environs de $\Omega = 0.56$ pour le cas (i). Sa position se déplace vers la droite avec le durcissement des valeurs des constantes de force, il se situe à $\Omega = 0.59$ pour le cas (ii) et à $\Omega = 0.62$ pour le cas (iii). La hauteur du pic a le même comportement (augmente) que la position en fonction de durcissement.

Le pic observé indique la présence d'un état discret à cette fréquence. Ce dernier est identifié comme une résonance de type Fano due à une interaction entre les états localisés du domaine de l'interface et les modes propageants des deux sous systèmes parfaits.

Les résonances de Fano sont habituellement évoquées pour décrire l'interférence entre un mode transmis de propagation et un mode localisé, que lui-même assortit les états évanescents du guide d'ondes. Il est par conséquent évident que les modes évanescents soient nécessaires pour une description complète de la dynamique globale et des amplitudes de dispersion dans un système, bien qu'ils ne contribuent pas au transport d'énergie.

Après avoir atteint son maximum, le coefficient T repasse par zéro dans un intervalle de fréquence qui se déplace vers les hautes fréquences avec le durcissement des constantes de force.

$\Omega \in [0.94, 1.00]$, pour le cas (i).

$\Omega \in [0.99, 1.03]$, pour le cas (ii).

$\Omega \in [1.04, 1.12]$, pour le cas (iii).

Après le passage par zéro dans les intervalles cités pour les trois cas, le coefficient T augmente à nouveau avec la fréquence. Cette fois-ci l'allure de T a un comportement inverse avec le durcissement des constantes de force de la pointe, par conséquent on observe une fenêtre entre T et R plus grande dans le cas (iii) puis elle diminue pour (ii) et devient la plus petite pour le cas (i).

b) Dans le deuxième emplacement :

Sur la figure (5.4b), le coefficient T commence toujours par une valeur nulle puis il augmente au fur et à mesure que la fréquence augmente, à l'exception du premier cas (i), où T diminue légèrement à la fréquence $\Omega = 1.92$.

Dans ce cas, le coefficient T est inversement proportionnel au durcissement des constantes élastiques de la chaîne par rapport à la surface.

Dans les trois possibilités, pour la position de l'atome du joint, les coefficients T et R ont un point d'intersection à la même fréquence $\Omega = 1.80$ et se situe à la même hauteur qui est (0.5). L'analyse, des différentes courbes de diffusion, permet de dire que les spectres de transmission peuvent être considérés comme identifiant des dispositifs des structures spécifiques et peuvent donc être employés pour leur caractérisation.

c) Dans le troisième emplacement :

Sur la figure (5.5b), le coefficient T commence toujours par une valeur nulle puis augmente légèrement au fur et à mesure que la fréquence augmente, puis il repasse par zéro à la fréquence $\Omega = 1.73$ dans les trois possibilités.

Dans ce cas, le coefficient T est proportionnel au durcissement des constantes élastiques de la chaîne par rapport à la surface.

Dans le cas (i), les coefficients T et R n'ont aucun point d'intersection, pour (ii), il y a trois points d'intersection aux fréquences $\Omega=1.83, 1.86$ et 1.89 . Pour le cas (iii), on dénombre un

seul point d'intersection à la fréquence $\Omega = 1.81$. Toutes ces intersections se situent à la même hauteur qui est (0.5).

Sur la figure (5.6), nous avons tracé les courbes de conductance des trois topologies d'interface entre les deux sous systèmes en fonction de la fréquence normalisée Ω , et ce dans les trois possibilités des constantes élastiques dans les deux sous groupes formant le nanocontact (de l'adoucissement au durcissement).

Nous avons donné également les conductances des deux sous groupes parfaits. Notons que ces derniers présentent des paliers qui indiquent le nombre de modes propageant de chaque système parfait.

Sur la dernière figure (5.7), nous avons tracé les courbes de conductance des trois configurations géométriques d'interface en fonction de la fréquence normalisée Ω , et ce dans le cas où les masses des deux sous systèmes formant le nanocontact sont différentes. Nous avons choisi arbitrairement trois valeurs de $m=0.5, 1.0$ et 2.0 (m : représente le rapport des masses des deux sous systèmes, il est égal à m'/m).

Nous remarquons sur cette figure que lorsque la masse des atomes de la pointe est grande devant celle des atomes de la surface, la transmission (qui représente la conductance dans ce cas) est importante et elle se décale légèrement vers les basses fréquences dans le cas de la première possibilité de placement de la pointe. Dans les deux autres formes d'interfaces, les courbes de conductances présentent un pic important aux environs de la fréquence $\Omega \approx 1.35$. De plus, leurs hauteurs sont même ordre de grandeur (comparables).

Pour $\varepsilon = 2$, les pics observés sont identifiés comme des résonances de Fano dans les trois configurations géométriques.

Pour $\varepsilon = 0.5$ et $\varepsilon = 1$, la deuxième configurations d'interface ne présente pas de résonances de type Fano, et ce est dû probablement aux états localisés au niveau de la zone d'interface qui sont moins nombreux par rapport aux deux autres interfaces.

La comparaison entre les conductances des trois positions de l'atome du joint de contact permet de relever une conclusion importante : aux faibles fréquences c'est la première configuration qui favorise la transmission d'ondes ($\Omega \approx 0.55$), par contre aux hautes fréquences c'est la deuxième configuration d'interface qui favorise la transmission ($\Omega \approx 1.80$). Dans la troisième position, le comportement est complexe, après le passage par zéro, la conductance présente des oscillations.

Nous remarquons aussi, sur l'ensemble des courbes des trois formes géométriques d'interfaces, que la transmission est proportionnelle à la valeur de ε , ceci s'explique en partie par la capacité d'une onde ayant une amplitude de vibration importante (des atomes de la chaîne) de se diffuser et de traverser plus au moins l'interface.

En conclusion, nous avons présenté un modèle pour l'étude du transport de phonon par l'intermédiaire d'un autre type de nanocontacts atomiques, qui sont les points de jonction entre une pointe AFM et une surface. Ces jonctions sont considérées comme étant des interfaces entre deux sous-groupes atomiques modélisés respectivement par une chaîne et un plan atomiques et ce dans le cadre de l'approximation harmonique. Le but est de relever l'influence des différentes formes topologiques de nanocontacts et leurs impacts sur les propriétés vibrationnelles.

Références : Chapitre V

- [1] P. Gambardella, M. Blanc, K. Kuhnke, K. Kern, F. Picaud, C. Ramseyer, C. Girardet, C. Barreateau, D. Spanjaard and M.C. Desjonqueres, *Phys. Rev. B* **64**, 045404:1-17 (2001)
- [2] Binnig, G.; Quate C. F.; Gerber, Ch. *Phys. Rev. Lett.* **12**, 980 (1986)
- [3] K. Kern, H. Niehus, A. Schatz, P. Zeppenfeld, J. George and G. Comsa, *Phys. Rev.* **67**, vol 7 (1991)
- [4] J. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press, (1992)
- [5] A Khater, N Auby, and D Kechrakos; *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 3743 (1992)
- [6] M. Belhadi, A. Khater, O. Rafil, and J. Hardy, *phys. stat. sol. (b)* **228**, No. 3, 685 (2001)
- [7] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A. Virlovet, and K. Maschke, *Eur. Phys. J. B***15**, 435 (2000)
- [8] M. Belhadi, A. Khater, K. Maschke, *Surface Review and Letters*, Vol. 11, No.1, 87 (2004)
- [9] A. Fellay, F. Gagel, and K. Maschke A. Virlovet and A. Khater, *Phys. Rev. B***55**, 1707 (1997)
- [10] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957)
- [11] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970)
- [12] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986)
- [13] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev.*, **155**, 731 (1967)
- [14] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **20**, 4725 (1987)
- [15] H. Grimech and A. Khater, *Surf. Sci.* **323** (1995)
- [16] H. Grimech and A. Khater, *Surf. Sci.* **341** (1995)
- [17] Michael SF. 2006. More than a feeling : the AFM is enabling engineers to understand mechanical systems at the most basic level. *Mechanical Engineering - CIME*
- [18] J. A. Harley, A. High-Stiffness Axial Resonant Probe for Atomic Force Microscopy, *Journal Of Microelectromechanical Systems* Vol 10, N°3, (2001)
- [19] R. J. Grow, Silicon Nitride Cantilevers With Oxidation-Sharpended Silicon Tips For Atomic Force Microscopy, *Journal of Microelectromechanical Systems* Vol 11, N°4, (2002).
- [20] W. P. King, Design of AFM Cantilevers for Combined Thermomechanical Writing and Thermal Reading in Array Operation, *J. of Microelectromechanical Systems* Vol 11, N°6, (2002)
- [21] Zhong Q, Innis D, Kjoller K, Elings V. B. 1993. *Surf. Sci. Lett.* **290** : L688

Conclusions & perspectives

La compréhension des phénomènes physiques à l'échelle nanométrique est devenue indispensable au progrès des technologies de pointe. Les avancées enregistrées dans le domaine des nanosciences sont étroitement liées aux recherches fondamentales, tant expérimentales que théoriques. Des simulations reposant sur la connaissance de la structure électronique, l'environnement atomique et de l'énergie totale des systèmes, de basses dimensions, donnent maintenant accès à un grand nombre de propriétés qui peuvent être confrontées à l'expérience et qui sont importantes voire fondamentales pour de nombreuses applications. Par conséquent, les recherches dans le domaine des nanosciences ont un caractère pluridisciplinaire, ils vont sans doute s'amplifier dans les prochaines années car les potentialités d'applications sont énormes.

L'influence de la géométrie des nanocontacts sur les phénomènes de transport des phonons et des magnons dans des systèmes de basses dimensions est étudiée en utilisant la technique de raccordement, et ce pour les différents paramètres de la zone caractérisant le domaine du nanocontact (constantes de force, intégrale d'échange, les masses...) par rapport aux zones parfaites.

Nous avons montré qu'un nanocontact dans une structure à arrangement régulier d'atomes (et/ou de spins) laisse une empreinte caractéristique dans les courbes de transmission. Autrement dit, l'analyse des spectres obtenus par les expériences de diffusion d'ondes (élastiques ou de spins) contient des informations sur la structure, et nous renseignent sur l'importance des réflexions multiples au niveau du domaine nanostructuré.

La création de nouvelles lacunes, dans un film mince, conduit à l'apparition de résonances supplémentaires sur les courbes de conductance (transmission) des phonons et des magnons. Ces dernières sont dues aux interactions entre les états propageants du système et les nouveaux états localisés créés autour des nanocontacts formés.

Les résultats obtenus, concernant les densités spectrales et les densités d'états phononique et magnonique des systèmes étudiés, sont comparables à ceux qui se rattachent aux phénomènes électroniques des systèmes perturbés de basses dimensions.

L'existence d'un nanocontact peut jouer le rôle d'un filtre sélectif pour certaines ondes dans les structures de basses dimensions. Ils permettent ainsi d'apporter une réponse cohérente et complète quant à l'influence de la morphologie du nanocontact sur les propriétés vibrationnelle et

magnétique sur leur éventuelle utilisation comme filtres dans des applications pour augmenter ou diminuer la conductance d'un système.

Les résultats numériques concernant la dynamique des l'interfaces (les trois possibilité de positionnement de la chaîne) sont identiques aux basses fréquences. Nous constatons un comportement similaire pour les trois interfaces lorsque la masse de la chaîne plus grande devant celle du plan atomique.

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

Perspectives

Parmi les perspectives offertes par ce travail, citons :

- étudier l'influence de la combinaison de plusieurs nanostructures en même temps (défaut de masses, positions atomiques, lacunes, dislocations...), dans les films minces avec différentes épaisseurs, sur la dynamique vibrationnelle et les excitations magnétiques à couplage ferromagnétique, antiferromagnétique ou les deux en même temps.
- généraliser et envisager l'application de la méthode de raccordement à des systèmes tridimensionnelles pour des structures à cristallisation CC, CFC et HC, et calculer aussi d'autre grandeurs physiques : telle que la chaleur spécifique.
- mieux comprendre la nature des interfaces, des interactions entre nanomatériaux, le rôle des joints de contact et leurs influences sur les différentes propriétés physiques notamment la dynamique du système magnétique afin de comprendre le transport de l'information.
- étudier les nanomatériaux dans leur environnement réel (tenir compte des interactions avec un solide).
- reprendre les calculs, dans le cas de la pointe AFM, en considérant des géométries plus complexes.

Annexe I

Rappels sur les nanosciences

I. Introduction

On assiste, aujourd'hui, à une course scientifico-commerciale, à l'échelle mondiale, dans le domaine des nanosciences [1-2]. Cette dernière explore les caractéristiques de la matière à l'échelle manométrique dans toutes les disciplines [3]. De nombreux travaux de recherche industrielle et universitaire sont en cours autour des nanoobjets tant au niveau de l'élaboration que des études structurales et physiques [4-6]. L'objectif est d'avoir des matériaux plus petits, plus légers et surtout plus fiables ; et les enjeux mis en œuvres concernent tous les domaines.

L'essor de la science des nanos prend sa source dans la mise en évidence de nouvelles propriétés (biologiques, optiques, magnétiques, mécaniques, chimiques, et physiques) apparaissant quand la taille des objets se réduit [7-8]. Son évolution est rendue possible grâce aux progrès enregistrés dans l'élaboration d'objets de très petites dimensions et la mise au point de techniques de caractérisations appropriées permettant d'avoir des informations à l'échelle du manomètre (et même de l'Angstrom). Parmi ces techniques et les moyens nanotechnologiques spécifiques : la microscopie en champ proche magnétique ou non (MFM/AFM), optique (SNOM), microscopie de photo-électron couplée au rayonnement synchrotron (PEEM),...

II. Définitions

Nanoscience : c'est l'étude des phénomènes de manipulation des matériaux aux échelles atomiques et moléculaires.

Le mot « **nanotechnologie** » regroupe l'ensemble des techniques qui permettent de manipuler, c à d : de concevoir, fabriquer, déplacer, assembler, caractériser des matériaux, des objets, des mécanismes ou systèmes fonctionnels obtenus en contrôlant la matière à l'échelle manométrique (entre 1 nm -100 nm).

Nanomatériaux : sont des composés, de taille réduite, constitués de nanoobjets ou de nanoparticules qui présentent des propriétés spécifiques de l'échelle nanométrique.

III. Les différents types de nanomatériaux

a) Nanoparticules : (appelés aussi nanocomposites) : ils sont constitués d'un nanoobjet incorporé dans une matrice d'oxyde ou de polymère. Les nanostructures ainsi formées sont des matériaux monophasés dans lesquels matrice et nanoobjet sont liés chimiquement. Ces matériaux présentent des possibilités d'auto organisation. Parmi ce type nous citons : C60, C70.

b) Nanofils (nanofibres ou nanotubes) : Le composant le plus connu dans cette catégorie est le nanotube de carbone ; découvert en 1991 par S. Iijima [9]. Il présente la particularité d'être 50000 fois plus fin qu'un cheveu et peut être plié et déformé sans jamais se casser [10-12]. On peut envisager plusieurs applications dans des secteurs variés : diodes, blindage électromagnétique, écrans plats, pointe de microscope et autres.

Les nanotubes sont des structures tubulaires creuses. Chaque extrémité peut être ouverte ou fermée par un couvercle contenant six (6) pentagones, de sorte que les couvercles forment un fullerène s'ils sont regroupés [13].

c) Couches minces : La caractéristique essentielle d'une couche mince étant sa faible épaisseur. Ses propriétés physiques et particulièrement ses propriétés de transport sont très fortement dépendantes de l'épaisseur, il importera donc de connaître celle-ci avec la plus grande précision possible. En pratique, il faut savoir que la notion d'épaisseur d'une couche mince n'est pas une notion simple. En effet, lorsqu'une couche est tellement mince qu'elle n'est plus continue, on conçoit aisément que la notion d'épaisseur puisse être très ambiguë. D'autre part, une couche mince peut souvent s'apparenter à une sorte d'éponge sur le plan structural, ce qui revient à dire qu'elle possède dans sa structure de nombreux trous constitués, soit de molécules de gaz occlus, soit de vide (lacunes).

IV. Les propriétés spécifiques des nanomatériaux

L'étude et l'utilisation des matériaux nanostructurés connaissent un essor considérable en raison de leurs propriétés particulières par rapport aux matériaux massifs.

En effet, dans le monde de l'infiniment petit toutes les propriétés changent avec la taille. Par exemple deux (02) atomes n'auront pas la même température de fusion, la même couleur et la même rigidité que quinze (15) atomes. Pourquoi ?

La réponse est simple, dans le cas des deux atomes, les électrons sont condamnés à rester près des deux noyaux, avec des énergies possibles bien précises ; en revanche, dans un amas d'atomes (15), chaque électron n'est plus confiné à son noyau. Par conséquent, lorsque on réduit la taille, les électrons peu nombreux, adoptent un comportement individuel obéissant à des nouvelles lois, celles de la mécanique quantique.

En conclusion, les caractéristiques des nanomatériaux, en particulier leur couleur, leur conductivité et leur réactivité changent d'une manière substantielle.

V. Méthodes de caractérisation

Les nanomatériaux sont des objets dont les caractéristiques structurales et physico-chimiques réclament à la fois des moyens «classiques» mais aussi des techniques spécifiques adaptées à leurs tailles.

Les méthodes d'analyses dites « standards » sont multiples, allant de la chromatographie, de la rhéologie, de la spectrométrie de masse en passant par la RMN, les spectrométries UV-Visible, IR, de la fluorescence à l'électrochimie ou à la RPE. Ces techniques pouvant être utilisées seules ou combinées.

Certaines méthodes plus spécifiques sont cependant indispensables pour déterminer finement les caractéristiques structurales et physico-chimiques de ces nanoobjets. La microscopie de champs proche (STM, AFM, optique, SNOM) est une méthode incontournable à la fois pour imager les atomes et/ou les molécules et pour étudier les propriétés électroniques de ces nanoobjets. Pour déterminer l'arrangement des atomes, la géométrie du site, la densité électronique et la taille de symétrie de ces objets, on utilise les techniques de spectroscopies d'absorption X, de diffraction X, de diffusion X couplées au rayonnement synchrotron.

A côté des différentes méthodes citées, la microscopie électronique en transmission reste un moyen d'études structurales, chimiques et électronique unique. Elle permet en effet une analyse multi-échelle et multi-technique grâce au couplage de l'imagerie, de la diffraction et de la spectroscopie (EELS, EDX).

VI. Applications des nanomatériaux

Dans le futur proche, les domaines d'applications des nanomatériaux seront très vastes [14-16], de la microélectronique et des télécommunications à la science des matériaux ; de l'agriculture à

la sécurité nationale ; de la physique chimie à la biologie moléculaire et cellulaire ; de la médecine à l'industrie automobile...

Citons des exemples d'applications :

1) Dans le domaine de l'industrie : Les nanotechnologies permettront la conception de nouveaux matériaux plus légers et de meilleures propriétés mécaniques (par exemple le cuivre cristallin est trois fois plus résistant que le cuivre classique). Ils seront en outre plus malléables. Ces propriétés vont être exploitées dans les secteurs aussi divers que les matériaux de construction pour les bâtiments, les appareils électroménagers et les appareils médicaux...

2) Dans le domaine de l'environnement : Dans l'industrie des moyens de transport terrestres, maritimes, aériens fabriqués avec des nanomatériaux seront plus légers, emporteront plus de charge utile, consommeront moins d'énergie et seront donc moins polluants.

3) Dans le domaine de la médecine et la biochimie : Les applications seront plus passionnantes, par exemple le problème des déchets sera réglé si nous réussissons à construire les équivalents robots des insectes ou de micro-organismes qui recyclent les cadavres ou les excréments et les réintroduisent dans le circuit des nutriments (mieux qu'une usine d'incinération).

Un jour, on va pouvoir fabriquer de minuscules injecteurs de médicaments et nous aurons la possibilité d'attaquer directement les tumeurs grâce à des outils ou des robots infiniment plus petits que les pores.

4) Dans le domaine de l'information : On peut citer comme applications actuelles : les puces avec un souci de miniaturisation toujours plus poussée pour avoir une grande capacité de stockage de l'information.

L'optoélectronique tend également à la miniaturisation avec l'utilisation de composants comme les puits quantiques ou les afficheurs à cristaux liquides.

VII. Conclusion

Le progrès des nanosciences changera radicalement le mode de vie à de la planète, les experts estiment que les nanotechnologies sont susceptibles de modifier de façon substantielle les procédés de fabrication de nombreuses industries à moyen et à long terme. Des retombées sont attendues dans de très nombreux secteurs (électronique, spatial, biomédical, matériaux...).

La tendance à la miniaturisation constatée depuis quelques années est appelée à se poursuivre et à s'accélérer. Cela passe inévitablement par la mise au point de nouvelles méthodes de préparation, d'étude, d'exploitation des propriétés spécifiques de la nouvelle matière.

Le but ultime des nanoscience peut se résumer comme la parfaite maîtrise de la matière au niveau atomique et moléculaire et la production de matériaux améliorés.

Références : Annexe I

- [1] S. Hagège : “Des nanosciences au nanobusiness, un modèle à l’américain”, *Ambassade de France USA, Mission pour la science et technologie*, 09/2002
- [2] I. Asia Pulse, CMP-Cientifica, repris par Dr Cristina Roman : “ Its ours to lose, an analysis of EU, Nanotechnology funding and ths Sixth Framework Programme” ENA (*European Nanobusiness Association*), 3 rd October 2002
- [3] *Hitachi Reserarch Institute*, “Personnel Communication”, 2001, cité par : M. C. Roco ; W. Sims Bainbrige : « Societal implications of nanoscience and nanotechnology », *National science Foundation*, march 2001
- [4] M. C. Roco, National Science Fondation-Chair U. S. National Science and Technology Council’s subcommittee on Nanoscale Science, Engineering and Technology (NSET): “International Strategy for nanotechnology research”, in *Journal of nanoparticules*, n°3, vol 5-6, 12/2001, pp 353-360
- [5] E. Gaffet : « Nanomatériaux », *Innovation 128*, 1998
- [6] M. C. Roco : « Research Programs on nanotechnology in the world », in : *Nanostructure science and technology R&D status and trends in nanoparticules, nanostructured materials, and nanodevices*, Chapitre 8, WTEC, 09/1999
- [7] “Nanocomposites à charges lamellaire et matrice polymère”, 2003 compte d’un atelier de prospective sur le sujet, Belgium Polymer Group, ARAMM, INSA- Lyon, FPL
- [8] Business Communications Company Inc : « Opportunities in Nanostructured Materials : energy, catalyc and structural applications », décembre 2001
- [9] S. Iijima, *Nature (London)*, 354, (1991), 56-58
- [10] J. F. Després, E. Daguerre, K. Lafdi, *Carbon*, 33, (1995), 87-92
- [11] M. R. Falvo, G. J. Clary, R. M. Taylor III, V. Chi, F. P. Brooks Jr, S. Washburn, R. Superfine, *Nature* 389, 582 (1997)
- [12] S. Iijima, Ch. Brabec, A. Maiti, J. Bernholc, *J. Phys. Chem.*, 104, (1996), 2089-2092
- [13] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, San Diego, (1995)
- [14] J. Boileau : « Nanotechnologies et Défense », *Défense*, n°96, décembre 2001
- [15] *Freedonia Group* : « Nanomaterials US Industry Study », juin 2003
- [16] A. Thorel, Maître de recherche à l’*Ecole des Mines de Paris*, chef de projet “Matériaux” des Grandes Ecoles : “Rapport sur l’atelier: Nanomaterials : towards engineering applications”, Montréal (2000)

Annexe II

Approximation harmonique des forces centrales - Equations de mouvement

Soit un repère galiléen de vecteurs de bases $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, un solide composé de N atomes et dont le centre de gravité est supposé immobile. A un instant t, la position du l-ème atome sera désigné par le vecteur $\vec{r}(l, t)$:

$$\vec{r}(l, t) = \vec{r}_0(l) + \vec{u}(l, t) \dots\dots\dots(\text{AII. 1})$$

$\vec{r}_0(l)$: Représente la position de l'atome l dans la configuration d'équilibre, et $\vec{u}(l, t)$ son déplacement par rapport à cette position. Nous choisirons par la suite les déplacements $\vec{u}(l, t)$ comme variables dynamiques en supposant que le système électronique n'est pas perturbé par les vibrations atomiques.

Soit ϕ l'énergie potentielle des interactions atomiques du solide, la force de rappel $\vec{F}(l, t)$ exercée sur du l-ème atome par le reste du système s'écrit

$$\vec{F}(l, t) = -\vec{\nabla}_l \phi \dots\dots\dots(\text{AII. 2})$$

Cette équation traduit le fait que chaque atome se trouve dans le champ de force crée par tous les autres atomes. La fonction ϕ est responsable de ce champ qui assure la cohésion du solide et génère et entretient les vibrations atomiques. Pour des faibles déplacements atomiques, l'approximation harmonique est valable et on peut considérer que le deuxième ordre du développement en série de Taylor de la fonction énergie potentielle du cristal.

Dans le cadre de cette approximation et des forces centrales, la fonction ϕ prend la forme suivante :

$$\phi = \frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \sum_l \phi(l, l') \dots\dots\dots(\text{AII. 3})$$

Chaque terme $\phi(l, l')$ ne dépend que des positions relatives des deux atomes l et l', et sera considéré comme fonction explicite des trois composantes cartésiennes $r_\alpha(l, l', t)$, ($\alpha=x, y, z$) du vecteur $\vec{r}(l, l', t)$ qu'on définit par :

$$\vec{r}(l, l', t) = \vec{r}(l', t) - \vec{r}(l, t) \dots\dots\dots(\text{AII. 4})$$

On en déduit l'expression d'une variation élémentaire $d\vec{r}(l, l', t)$ du vecteur $\vec{r}(l, l', t)$ en fonction des déplacements respectifs des atomes l et l'.

$$d\vec{r}(l, l', t) = \vec{u}(l', t) - \vec{u}(l, t) \dots\dots\dots(\text{AII. 5})$$

Nous supposerons par la suite que les déplacements atomiques autour de leur position d'équilibre sont suffisamment petits, quel que soit le couple (l, l'), pour que l'on puisse traiter

les variables $u_\alpha(l,t)$ dans l'hypothèse de l'approximation harmonique. Cette approximation consiste à négliger les termes d'ordre supérieur à 2 dans les développements de Taylor des fonctions $\phi(l,l')$:

$$\phi(l,l') = \phi_0(l,l') + \sum_\alpha \phi'_\alpha(l,l') [u_\alpha(l',t) - u_\alpha] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta} [u_\alpha(l',t) - u_\alpha(l,t)] [u_\beta(l',t) - u_\beta(l,t)] \quad (\text{AII. 6})$$

Avec

$$\phi'_\alpha(l,l') = \left[\frac{d\phi(l,l')}{dr_\alpha(l,l')} \right]_0 \quad (\text{AII. 7a})$$

Et

$$\psi_{\alpha\beta}(l,l') = \left[\frac{d^2\phi(l,l')}{dr_\alpha(l,l') \cdot dr_\beta(l,l')} \right]_0 \quad (\text{AII. 7b})$$

Où $(\alpha, \beta = x, y, z)$

L'indice zéro indique que les fonctions sont calculées pour des configurations d'équilibre, ce qui annule les constantes $\phi'_{\alpha\beta}(l,l')$. Le premier terme $\phi_0(l,l')$ étant constant, il est sans intérêt pour la description des vibrations atomiques.

D'après la loi fondamentale de la dynamique, la α -ème composante cartésienne F_α de la force de rappel qu'exercent les atomes du système sur le l -ème atome de masse m_l s'écrit :

$$F_\alpha(l,t) = m_l \frac{d^2 u_\alpha(l,t)}{dt^2} \quad (\text{AII, 8})$$

D'après (AII, 2), (AII, 3) et (AII, 6), la même composante $F_\alpha(l,t)$ s'exprime par :

$$F_\alpha(l,t) = \sum_{l' \neq l} \sum_\beta \psi_{\alpha\beta}(l,l') [u_\beta(l',t) - u_\beta(l,t)] \quad (\text{AII. 9})$$

Dans cette équation, $\psi_{\alpha\beta}(l,l')$ a la même dimension qu'une constante de force $k(l,l')$ définie en général par :

$$k(l,l') = \left[\frac{d^2\phi(l,l')}{dr^2(l,l')} \right]_0, (l \neq l') \quad (\text{AII, 10})$$

Pour établir la relation entre les deux constantes $\psi_{\alpha\beta}(l,l')$ et $k(l,l')$, nous procéderons par décomposition des dérivées de (AII, 7a). Afin d'alléger les équations, nous ôterons provisoirement les indices l et l' des composantes cartésiennes r_α ($\alpha = x, y, z$) et du module $r = [(r_x)^2 + (r_y)^2 + (r_z)^2]^{1/2}$ de vecteur $\vec{r}(l,l')$. En utilisant la relation : $\frac{d}{dr_\beta} = \left(\frac{dr}{dr_\beta}\right) \frac{d}{dr}$, nous

obtenons successivement :

$$\frac{d^2\phi(l,l')}{dr_\alpha dr_\beta} = \frac{d}{dr_\alpha} \left(\frac{d\phi(l,l')}{dr} \frac{dr}{dr_\beta} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\phi(l,l')}{dr_\alpha dr_\beta} = \frac{r_\beta}{r} \frac{d}{dr_\alpha} \left(\frac{d\phi(l,l')}{dr} \right) + \left(\frac{d\phi(l,l')}{dr} \right) \frac{d}{dr_\alpha} \left(\frac{r_\beta}{r} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\phi(l,l')}{dr_\alpha dr_\beta} = \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \left(\frac{d^2\phi(l,l')}{dr^2} \right) + \left(\frac{d\phi(l,l')}{dr} \right) \frac{d}{dr_\alpha} \left(\frac{r_\beta}{r} \right)$$

En prenant les deux membres à la configuration d'équilibre, le deuxième terme contenant $\frac{d\phi(l,l')}{dr}$ s'annule et on obtient la relation suivante :

$$\psi_{\alpha\beta}(l,l') = \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) k(l,l') \dots\dots\dots(AII. 11)$$

D'après les relations (AII. 8) et (AII. 9), l'équation de mouvement du l-ème atome suivant la direction cartésienne α ($\alpha=x, y, z$) peut donc s'écrire :

$$m_l \frac{d^2 u_\alpha(l,t)}{dt^2} = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right)_0 k(l,l') [u_\beta(l',t) - u_\beta(l,t)] \dots\dots\dots(AII. 12)$$

Dans le cadre d'une approximation harmonique, l'excitation d'un mode propre de fréquence angulaire ω au sein du solide donne lieu à des oscillations régulières qu'on peut décrire, pour une température donnée, par des équations de la forme :

$$u_\alpha(l,t) = u_\alpha(l, \omega) \cdot \exp(j \omega t) \dots\dots\dots(AII. 13)$$

Où : $u_\alpha(l, \omega)$ est l'amplitude de vibration de l'atome l suivant la α -ème direction cartésienne. En insérant l'équation (AII. 13) dans (AII. 12), nous déduisons pour chaque fréquence ω une équation indépendante du temps qui s'écrit :

$$m_l \omega^2 u_\alpha(l, \omega) - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right)_0 k(l,l') [u_\beta(l', \omega) - u_\beta(l, \omega)] = 0 \dots\dots\dots(AII. 14)$$

Cette équation traduit ainsi, dans l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales, les corrélations entre les déplacements atomiques induits par l'agitation thermique.

Annexe III

Calcul des vitesses de Groupe

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

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

Sinon, on impose $V_g=0$.

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

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

$$D(q)\vec{u} = -\omega^2\vec{u} \dots\dots\dots(\text{AIII. 2a})$$

$$D(q)\vec{u} = -\omega\vec{u} \dots\dots\dots(\text{AIII. 2b})$$

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

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

$$H\Psi = E\Psi \dots\dots\dots(\text{AIII. 3})$$

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

Supposons connus tous les éléments des équations (AIII. 2a, 2b)

$$D(q_0)\vec{u}(q_0) = -\omega^2(q_0)\vec{u}(q_0), \text{ (phonons)} \dots\dots\dots(\text{AIII. 4a})$$

$$D(q_0)\vec{u}(q_0) = -\omega(q_0)\vec{u}(q_0), \text{ (magnons)} \dots\dots\dots(\text{AIII. 4b})$$

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

$$q = q_0 + \Delta q \dots\dots\dots(\text{AIII. 5})$$

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

$$\vec{u}(q) = \vec{u}(q_0) \dots\dots\dots(\text{AIII. 6})$$

Par contre :

$$D(q) = D(q_0) + \Delta q \frac{\partial D}{\partial q} \dots\dots\dots(\text{AIII. 7})$$

Et

$$\omega^2(q) = \omega^2(q_0) + \Delta q \frac{\partial \omega^2}{\partial q}, \text{ (phonons)} \dots\dots\dots(\text{AIII. 8a})$$

$$\omega(q) = \omega(q_0) + \Delta q \cdot \frac{\partial \omega}{\partial q}, \text{ (magnons).....(AIII. 8b)}$$

Pour les phonons, on réécrit l'équation (AIII. 2a) en tenant compte de ces approximations, ce qui donne successivement :

$$\begin{aligned} & \left[D(q_0) + \omega^2(q_0) + \Delta q \cdot \frac{\partial D}{\partial q} + \Delta q \cdot \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \right] \bar{u}(q_0) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \bar{u} \\ \Rightarrow & \bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \bar{u}' \bar{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \\ \Rightarrow & \frac{\partial \omega}{\partial q} = -\frac{1}{2\omega} \bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} \text{.....(AIII. 9a)} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} & \left[D(q_0) + \omega(q_0) + \Delta q \cdot \frac{\partial D}{\partial q} + \Delta q \cdot \frac{\partial \omega}{\partial q} \right] \bar{u}(q_0) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = -\frac{\partial \omega}{\partial q} \bar{u} \\ \Rightarrow & \bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = -\frac{\partial \omega}{\partial q} \bar{u}' \bar{u} = -\frac{\partial \omega}{\partial q} \\ \Rightarrow & \frac{\partial \omega}{\partial q} = -\bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} \text{.....(AIII. 9b)} \end{aligned}$$

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

Annexe IV

Formes explicites de certaines matrices utilisées dans la thèse

Cas des phonons :

Structure à trois chaînes parallèles

La matrice A

$$[A] = \begin{pmatrix} \Omega^2 - 2 - r & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \frac{-r - r}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \Omega^2 - 1 - r & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-r - r}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega^2 - 2 - 2r & 0 & 0 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{r}{2} & -1 & 0 & \frac{-r - r}{2} \\ 0 & 1 & 0 & \Omega^2 - 2 - 2r & 0 & 1 & \frac{r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 & 0 & \frac{-r - r}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega^2 - 2 - r & 0 & 0 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{r}{2} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \Omega^2 - 1 - r & 0 & 0 & \frac{r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La matrice B

$$[B] = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{r}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-r}{2} & \frac{-r}{2} & -1 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{r}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 & 0 & \frac{r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{-r}{2} & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-r}{2} & \frac{-r}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Cas des magnons :**Structure à trois chaînes de spins parallèles**

Matrice A

$$A = \begin{pmatrix} \Omega-3 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & \Omega-4 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & \Omega-3 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Matrice B

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Annexe V

Les éléments de la matrice des fonctions de Green

Pour notre étude, l'opérateur $G(\omega^2)$ est obtenu à partir de la matrice défaut D en suivant les étapes suivantes :

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \dots \dots \dots (AV. 1)$$

Pour expliciter les éléments des matrices D et $G(\omega^2)$, de rang S , nous choisissons la base des S vecteurs $|e_n\rangle$ qu'on définit par : $|e_n\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \delta_{nm} \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} I \\ m \\ I \end{matrix}$.

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

($S=3N$, dans le cas des phonons et $S=N$, dans le cas des magnons).

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

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

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

$$\langle e_n | e_n \rangle = \delta_{nm} \dots \dots \dots (AV. 2)$$

Et l'équation suivante de fermeture :

$$I = \sum_k |e_k\rangle \langle e_k| \dots \dots \dots (AV. 3)$$

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

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

Soit $|u_p\rangle$ ($p=1, \dots, S$), les vecteurs propres de la matrice dynamique D , et ω_p^2 les valeurs propres correspondantes. Nous considérons par la suite que la relation est normalisée : $\langle u_p | u_p \rangle = 1$.

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

$$\langle u_{p'} | D | u_p \rangle = \omega_p^2 \langle u_{p'} | u_p \rangle$$

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

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta_{pp'} \dots \dots \dots (AV. 4)$$

1- Calcul des éléments de $G(\omega^2)$

Dans le but d'exprimer les éléments $\langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle$ de la matrice $G(\omega^2)$ en fonction des valeurs et des vecteurs propres de la matrice D, nous introduisons la matrice B de passage entre les deux bases $(|u_p\rangle)$ et $(|e_n\rangle)$:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = B \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \dots \dots \dots (AV. 5-a)$$

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

D'après (AV. 5-a) : un vecteur propre $|u_p\rangle$ est une combinaison linéaire des S vecteurs $|e_n\rangle$

$$|u_p\rangle = \sum_{n=1}^S \langle e_p | B | e_n \rangle |e_n\rangle \dots \dots \dots (AV. 6)$$

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

$$\text{En effet, d'après (AV. 6) : } \langle e_i | u_p \rangle = \sum_{n=1}^{N_n} \langle e_p | B | e_n \rangle \langle e_k | e_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_n} \langle e_p | B | e_n \rangle \delta_{kn}$$

D'où l'équation :

$$\langle e_k | u_p \rangle = \langle e_p | B | e_k \rangle \dots \dots \dots (AV. 7)$$

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

$$\langle u_p | u_p \rangle = \sum_n \sum_{n'} \langle e_n | B^+ | e_p \rangle \langle e_p | B | e_m \rangle \delta_{nm}$$

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

$$\langle u_p | u_p \rangle = \langle e_p | B.B^+ | e_p \rangle.$$

D'après (AV. 4), on obtient :

$$\langle e_p | B.B^+ | e_p \rangle = \delta_{pp} \dots \dots \dots (AV. 8)$$

On en déduit que la matrice B, définie par (AV. 5-a), vérifie la relation :

$$B.B^+ = I \dots \dots \dots (AV. 9)$$

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

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

$$I = \sum_p |u_p\rangle \langle u_p| \dots \dots \dots (AV. 10)$$

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

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

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

$$\langle e_n | L | e_m \rangle = \omega_n^2 \delta_{nm} \dots \dots \dots (AV. 11)$$

En utilisant l'équation (AV. 3), on explicite les éléments de la matrice $B^+ . L . B$ de la manière suivante :

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

En utilisant (AV. 7), (AV. 10) et la définition des vecteurs $|u_p\rangle$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\langle e_n | B^+ LB | e_m \rangle &= \sum \omega_i^2 \langle e_m | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle \\
&= \sum_i \langle e_m | D | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle \\
&= \langle e_m | D | e_n \rangle.
\end{aligned}$$

Ainsi, si la matrice D est symétrique, elle vérifie :

$$D = B^+ LB. \dots\dots\dots (AV. 12)$$

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

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

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

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

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

En utilisant les équations (AV. 3), (AV. 13) et (AV. 14), les éléments de la matrice $G(\omega^2)$ peuvent s'écrire :

$$\langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle = \sum_p \sum_{p'} \langle e_n | u_p \rangle \frac{\delta_{pp'}}{(\omega^2 - \omega_p^2)} \langle e_m | u_{p'} \rangle \dots\dots\dots(\text{AV. 15})$$

$$\Rightarrow \langle e_n | G(\omega^2) | e_m \rangle = \sum_p \frac{\langle e_n | u_p \rangle \langle e_m | u_p \rangle}{(\omega^2 - \omega_p^2)}$$

2. Densités spectrales

2.1. Densité vibrationnelle

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

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

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

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum_n \gamma_n(\omega) \dots\dots\dots(\text{AV. 17})$$

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

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

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

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

On trouve :

$$\gamma_n(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \dots\dots\dots(\text{AV. 20})$$

D'après (AV. 15), les valeurs propres ω_p^2 de D représentent les pôles des éléments de l'opérateur $G(\omega^2)$.

Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire ε à la variable ω^2 , ce qui donne :

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

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

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

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\Omega) = \Omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) = 2\Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{ll'}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (\text{AV. 22})$$

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

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

$$N(\Omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{ll}(\Omega) = (-2\Omega/\pi) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\alpha}^{ll}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (\text{AV. 23})$$

2.2. Densités magnoniques

De la même manière que le cas des phonons, l'opérateur de Green s'exprime sous la forme :

$$G(\Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - D(Z, J)]^{-1} \dots \dots \dots (\text{AV. 24})$$

La matrice des densités spectrales, est donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(p,p')}(\Omega) = \sum_m L_{\alpha m}^p \cdot L_{\beta m}^{p'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) \dots \dots \dots (\text{AV. 25})$$

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

La densité d'état magnonique correspond à la somme de la trace des matrices des densités spectrales peut alors s'écrire ainsi :

$$N(\Omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{p,p}(\Omega) = (-1/\pi) \sum_{p\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\alpha}^{pp}(\Omega + j\varepsilon)]) \dots \dots \dots (\text{AV. 26})$$

Résumé

Dans cette thèse, nous étudions en particulier la diffusion d'excitations des solides, sous leurs formes de phonons (ondes élastiques) et de magnons (ondes de spin), à travers certains types de nanocontacts atomiques qui font la jonction entre systèmes de basse dimensions.

Le premier cas sous étude est un joint atomique entre deux systèmes composés chacun de chaînes atomiques à trois couches parallèles. Nous analysons, pour ce nanocontact, trois géométries différentes. Elles sont obtenues respectivement par : deux lacunaire symétrique, deux lacunes asymétrique et plusieurs lacunes asymétriques. Les systèmes sont déposés sur un substrat, et exempt de tout type d'interactions.

Dans le deuxième cas, nous avons repris l'étude des formes géométriques des nanocontacts examinées précédemment, dans les mêmes conditions, et nous avons supposé l'existence d'un spin sur chaque site atomique orientés dans la même directions, ceci nous a permis d'avoir un accès direct au transport de magnons et à la diffusion d'ondes de spin via des nanocontacts magnétiques.

Le troisième cas de nanocontact sous étude est une jonction *magnetic gate* entre une chaîne atomique et une surface atomique plane. Selon les possibilités de placement de la chaîne sur la surface, nous examinons les trois configurations qui en résultent. Pour chaque configuration envisagée, nous considérons aussi trois possibilités de contraintes dans le domaine propre du nanocontact. Ceci permet de savoir l'influence de l'adoucissement, homogénéité et du durcissement des constantes caractérisant le système, sur les propriétés vibrationnelle et magnétiques en présence du nanocontact. De plus, dans le second type de nanocontact, nous étudions l'influence des masses des deux sous systèmes qui se situent de part et d'autre du domaine de l'interface.

Dans l'ensemble des cas, les coefficients de la transmission et de la rétro diffusion cohérentes, la conductance et les densités spectrales et les densités d'états des phonons et des magnons, sont calculés comme les éléments d'une matrice de diffusion du type Büttiker-Landauer. Ils sont analysés spécifiquement pour chaque configuration de nanocontacts. Les résultats numériques obtenus montrent des effets caractéristiques d'interférence entre les ondes incidentes et les états localisés de l'architecture géométrique et les paramètres du système dans le domaine du nanocontact. En particulier nous pouvons dégager les résonances de Fano pour chaque configuration. En modifiant, à l'échelle nanométrique, aussi bien la géométrie du nanocontact que ses paramètres dans son domaine propre, nous démontrons la possibilité de pouvoir fabriquer matériellement des filtres pour certains phonons et magnons du système, aussi bien qu'un portail pour amplifier la transmission d'autres.

Mots clés : diffusion, phonons, magnons, nanocontact, conductance, réflexion, transmission, densité d'état, interface et méthode de raccordement.