

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE



N°/...../.....

MÉMOIRE DE MASTER

FILIÈRE : Physique

SPÉCIALITÉ : Nanophysique

Présenté par :

BAHMED Liticia

Thème :

**Etude des ondes de spin dans les matériaux
Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni**

Soutenu le 02/07/2025 devant le jury composé de :

M.	BOURAHLA	Boualem.	Pr	U.M.M.T.O.	Président
Mme.	NAFA	Ouahiba	MCA	U.M.M.T.O.	Encadreur
Mme.	LEKADIR	Fazia	MCB	U.M.M.T.O.	Examineur
Mme.	CHALLALI	Rebiha	MCB	U.M.M.T.O.	Examineur

Année universitaire : 2024/2025

Dédicaces

« À moi-même, à mes parents et à ma meilleure amie Tita. »

Remerciements

Avant tout développement sur cette expérience il apparait opportun de commencer ce travail par des remerciements.

Je remercie Allah le Tout puissant et le bienveillant, de m'avoir accordés le succès, les bénédictions, la santé et surtout le courage d'accomplir ce travail et que sans lui je ne serais pas là.

À ceux qui, au fil des années, m'ont tant appris et accompagné dans la réalisation de mon objectif principal, celui de devenir un futur cadre en physique.

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou. Je tiens à remercier son directeur, Monsieur Abdelaziz Mezeghrane, ainsi que l'ensemble des membres du laboratoire pour leur accueil chaleureux et leur soutien, qui ont fait de mon stage de fin de cycle Master une expérience des plus enrichissantes.

Mes plus vifs remerciements sont principalement destinés à mes parents, qui ont toujours eu confiance en moi et m'ont soutenue dans tous mes choix.

Mes remerciements s'adressent particulièrement à ma promotrice Madame NAFA Ouahiba pour la confiance qu'elle m'a accordée, sa bienveillance, ainsi que ses judicieux conseils qui ont contribué à nourrir ma réflexion tout au long de la préparation et la rédaction de ce mémoire.

Je tiens également à remercier le Professeur Bourahla Boualem de m'avoir fait l'honneur de présider le jury, ainsi que le Docteur Lekadir Fazia et le Docteur Challali Rebiha pour avoir accepté d'évaluer ce travail.

Enfin, je ne saurais pas terminer sans mentionner ceux qui, de près ou de loin ont contribué à ma réussite.

Trouvez en ces mots ma profonde gratitude.

Table des matières

1	Généralités sur les ondes de spin	3
1.1	Introduction	3
1.2	Les propriétés magnétiques des matériaux	3
1.2.1	Matériaux magnétiques durs	4
1.2.2	Matériaux magnétiques doux	4
1.3	Magnétisme des métaux de transition et des terres-rares	5
1.3.1	Les métaux de transition 3d	5
1.3.2	Les terres rares	7
1.4	Propriétés magnétiques de composés intermétalliques	8
1.4.1	Interactions d'échange magnétique	8
1.4.1.1	Interactions d'échange dans les MT	9
1.4.1.2	Interactions d'échange dans les TR	10
1.4.1.3	Interactions d'échange entre MT et TR	11
1.5	Méthodes théoriques pour l'étude des structures MT/TR/MT	12
1.5.1	Diagonalisation directe	12
1.5.2	Méthode des fonctions de Green	12
1.5.3	Méthode des matrices de transfert	12
1.5.4	Calculs ab initio (DFT)	12
1.5.5	Méthodes micromagnétiques	12
1.5.6	Méthode de raccordement	13
2	Dispersion des ondes de spin dans le Fer et le Nickel	14
2.1	Introduction	14
2.2	Théorie des ondes de spin	14
2.3	Ondes de spin dans les matériaux magnétiques	15
2.3.1	Théorie classique des ondes de spin	15
2.3.2	Théorie semi-classique des ondes de spins	15
2.3.3	Théorie quantique des ondes de spins	18
2.4	Étude d'un système BCC ferromagnétique	20
2.5	Étude d'un système FCC ferromagnétique	20
2.6	Résultats obtenues	20
2.6.1	Interprétation des résultats	21
3	Etats localisés des ondes de spin dans Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni	23
3.1	Introduction	23
3.2	Principe de la méthode utilisée	23
3.3	Définition de la matrice dynamique du système perturbé	25
3.3.1	Définition de la matrice défaut	25
3.3.2	Définition de la matrice de raccordement	25

3.4	Définition des grandeurs physiques	26
3.4.1	Définition des états localisés de spins dans un système	26
3.5	Systemes en sandwiches étudiés	26
3.5.1	Résultats obtenus	27
3.5.2	Interprétation des résultats obtenus	30

Bibliographie		33
----------------------	--	-----------

Table des figures

1.1	Cycle d'hystérésis typique d'un matériau magnétique dur. H_C est le champ coercitif, M_R l'aimantation rémanente et M_S l'aimantation à saturation[11].	4
1.2	Cycle d'hystérésis typique d'un matériau magnétique doux [11].	5
1.3	Représentation schématique de la variation de la densité d'état $D(E)$ en fonction de l'énergie E pour les électrons 3d et 4s. La zone grisée correspond au remplissage jusqu'au niveau de Fermi (celui-ci est représenté dans le cas du fer, du nickel, du cuivre et du zinc)[12].	6
1.4	Déplacement d'une quantité d'électrons de conduction depuis la bande de spin (\downarrow) vers la bande de spin (\uparrow)[10]	7
1.5	Représentation schématique du couplage entre les moments cinétiques de spin et orbital 4 f des ions libres de terres-rares[11].	8
1.6	Représentation schématique de la variation de l'interaction d'échange en fonction du rapport entre la distance entre 2 atomes (r_a) et le rayon de l'orbitale 3d (r_{3d}) [21].	10
1.7	Représentation schématique de l'oscillation de l'interaction d'échange de type RKKY entre deux moments magnétiques de TR distants de r [11].	10
1.8	Représentation schématique des interactions entre un atome de métal de transition MT et un atome de terre-rare TR (TR légère (a) et TR lourde (b)).[11] . .	11
2.1	Diagramme schématique d'une onde de spin dans un matériau ferromagnétique [32].	14
2.2	Décomposition d'un vecteur de spin.	16
2.3	Représentation des composantes d'un spin.	17
2.4	Courbe de dispersion du Fe	21
2.5	Vitesse de groupe du Fe	21
2.6	Courbe de dispersion du Ni	21
2.7	Vitesse de groupe du Ni	21
3.1	Représentation schématique d'un défaut magnétique couplant deux volumes ferromagnétiques selon le concept de la méthode de raccordement.	24
3.2	Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du Fer (réseau cubique centré). (a) $n=5$, (b) $n=6$, (c) $n=7$, (d) $n=8$ tel que n est le nombre de plans de Gd insérer dans le Fer	28
3.3	Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du Nickel (réseau cubique à faces centrées). (a) $n=5$, (b) $n=6$, (c) $n=7$, (d) $n=8$ tel que n est le nombre de plans de Gd insérer dans le Nickel.	30

Introduction générale

Au cours des dernières décennies, les progrès en physique du solide ont été largement stimulés par l'étude de systèmes hétérogènes composés d'au moins deux matériaux de natures différentes. De tels systèmes ont permis la découverte de nouveaux phénomènes fondamentaux et ont ouvert la voie à de nombreuses applications technologiques. Cette thématique a été étudiée dès 1956 par Meiklejohn et Bean [1], puis par Louis Néel dans les années 1960 [2], mais elle n'a connu un essor particulier qu'au début des années 90 et reste toujours un sujet d'actualité comme le prouve le nombre de publications dans les revues prestigieuses [3].

Les structures en couches minces, telles que les bicouches et multicouches ferromagnétiques ou ferrimagnétiques, jouent un rôle central dans ces avancées. La maîtrise croissante des techniques de dépôt et de caractérisation permet aujourd'hui de concevoir des systèmes complexes présentant des propriétés magnétiques ajustables via l'ingénierie d'interface. Dans ce contexte, les superréseaux formés de terres rares et de métaux de transition (TR-MT), comme les multicouches amorphes ou polycristallines GdFe ou TbFe [4], ont démontré des comportements magnétiques singuliers grâce à la coexistence d'un magnétisme localisé (terres rares) et d'un magnétisme de bandes (métaux de transition).

Parallèlement à ces approches, un intérêt croissant se porte sur l'étude des **ondes de spin** (ou **magnons**) dans les milieux magnétiques structurés, en tant que porteurs d'information sans transport de charge. Ces excitations collectives du réseau de spins offrent une alternative prometteuse à l'électronique conventionnelle dans le domaine de la **magnonique** [5], discipline émergente qui exploite la propagation, le confinement et la manipulation des ondes de spin.

Pour notre part, nous nous sommes intéressés plus précisément au cas de systèmes composés de deux matériaux de nature magnétique identique (ferromagnétique) ; il s'agit de super-réseaux magnétiques composés de terres rares et métaux de transition (TR-MT). Ces matériaux ont fait l'objet de très nombreuses études car ils constituent des candidats potentiels pour des applications telles que les aimants permanents haute performance [6] ou les capteurs par exemple. L'origine de leurs propriétés magnétiques exceptionnelles est due principalement à la coexistence de deux types complémentaires de magnétisme : le magnétisme localisé caractéristique des électrons $4f$ des terres rares et le magnétisme itinérant des électrons $3d$ des métaux de transition. On outre, les terres rares possèdent généralement une forte anisotropie magnétocristalline grâce aux interactions entre leur moment orbital et le champ cristallin. Par ailleurs, les métaux de transition, quant à eux, sont dotés d'une forte aimantation et une température de Curie élevée grâce aux interactions d'échange importantes entre les ions des éléments $3d$.

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude théorique des états magnoniques **localisés** dans des structures sandwichs de type **Fe/Gd/Fe** et **Ni/Gd/Ni**, dans lesquelles une couche mince de gadolinium (composée de quelques plans atomiques) est insérée entre deux milieux ferromagnétiques semi-infinis. Ces systèmes hybrides permettent d'explorer des phénomènes de confinement quantique et d'interférence magnétique à l'échelle nanométrique, notamment la

formation d'états magnoniques discrets piégés dans la couche intermédiaire.

L'objectif de cette étude est double, étudier la formation des états magnoniques localisés au sein de la couche de gadolinium en fonction de son épaisseur, du contraste d'aimantation et des interactions d'échange avec les milieux ferromagnétiques adjacents et analyser l'influence des interfaces Fe/Gd et Ni/Gd sur la structure de bandes magnoniques, ainsi que sur la nature des modes de spin, qu'ils soient propagatifs ou localisés.

Le manuscrit est organisé comme suit :

- **Le premier chapitre** présente les concepts fondamentaux du magnétisme, des ondes de spin, et du formalisme utilisé pour décrire les états magnoniques dans les structures multicouches.
- **Le deuxième chapitre** présente les propriétés physiques des matériaux de transition utilisés (Fe et Ni), ainsi que la détermination de leurs courbes de dispersion magnoniques et des vitesses de groupe associées.
- **Le troisième chapitre** est consacré à la simulation des courbes de dispersion et à l'identification des états localisés en fonction de la configuration structurale.

Chapitre 1

Généralités sur les ondes de spin

1.1 Introduction

L'étude des ondes de spin nécessite l'assimilation de concepts physiques fondamentaux. Ce chapitre introductif expose les bases théoriques indispensables à la compréhension des états magnétiques localisés dans les systèmes fer/gadolinium/fer (Fe/Gd/Fe) et nickel/gadolinium/nickel (Ni/Gd/Ni).

1.2 Les propriétés magnétiques des matériaux

Les matériaux à propriétés magnétiques sont actuellement exploités dans plusieurs secteurs, tels que la fabrication d'aimants permanents [6] ou encore les supports d'enregistrement magnétique à haute densité [7] [8]. Ces matériaux se caractérisent par leurs propriétés dites intrinsèques (liées à la composition chimique) et extrinsèques (fonction de la microstructure).

On appelle propriétés intrinsèques celles qui dépendent des caractéristiques structurales à l'échelle atomique, telles que la température de Curie, l'aimantation à saturation et l'anisotropie magnétocristalline. En général, ces propriétés sont fortement influencées par l'environnement local des atomes et par la distance entre voisins immédiats. Elles sont indépendantes de la quantité de matière. Pour la plupart des applications, il est nécessaire que la température de Curie soit supérieure à la température ambiante, ce qui implique l'utilisation de matériaux à base d'éléments de transition tels que le fer (Fe), le cobalt (Co) et le nickel (Ni). Par ailleurs, la recherche d'une forte aimantation privilégie les matériaux riches en fer ou en cobalt [9].

Le champ coercitif et l'aimantation rémanente sont des propriétés extrinsèques, déduites du cycle d'hystérésis, qui illustre la réaction d'un matériau soumis à un champ magnétique appliqué. Ce cycle reflète de manière globale les caractéristiques magnétiques d'un échantillon. L'aimantation rémanente correspond à l'aimantation résiduelle en champ nul, après saturation du matériau. Le champ coercitif est le champ magnétique opposé qu'il faut appliquer pour ramener l'aimantation à zéro, une fois le matériau saturé. La coercivité est souvent liée à l'anisotropie magnétique; elle peut être particulièrement élevée dans certains alliages ou composés combinant des éléments de terres rares (Nd, Dy, Y) avec des éléments de transition.

A partir de la forme du cycle d'hystérésis et de la valeur de la coercivité, on distingue trois grandes catégories de matériaux : matériaux magnétiques doux, durs et semi-durs.

1.2.1 Matériaux magnétiques durs

À température ambiante, les matériaux magnétiques durs sont soit ferromagnétiques, soit ferrimagnétiques. Ils nécessitent un champ magnétique externe très puissant pour atteindre la saturation. On peut qualifier leur aimantation de rémanente et permanente, le champ coercitif H_c requis pour éliminer l'aimantation M dans le matériau magnétique dur est supérieur à $10^4 A.m^{-1}$ ($\mu_0 H_c > 125.10^4 T$) [10]. Ces matériaux ont un cycle d'hystérésis large. Après l'annulation du champ externe, leur perméabilité est réduite et leur réaimantation s'avère difficile. Ils peuvent être utilisés dans la fabrication d'aimants permanents de haute puissance, tels que les alliages AlNiCo et certains alliages contenant des terres rares comme le NdFeB [9].

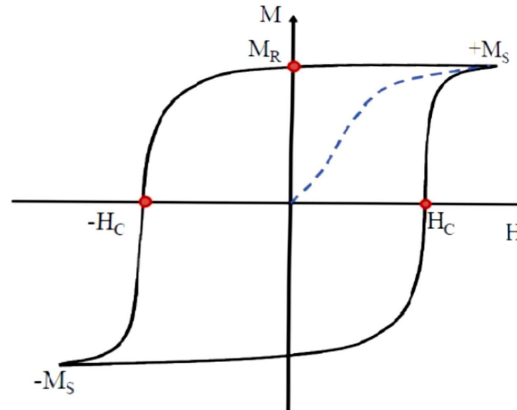


FIGURE 1.1 – Cycle d'hystérésis typique d'un matériau magnétique dur. H_C est le champ coercitif, M_R l'aimantation rémanente et M_S l'aimantation à saturation[11].

1.2.2 Matériaux magnétiques doux

Les matériaux magnétiques doux se distinguent par leur capacité à atteindre la saturation magnétique facilement avec un champ externe plutôt faible. Cette aimantation persiste même après l'interruption de l'application de ce champ. Il s'agit donc d'une aimantation rémanente forte. Cependant cette aimantation se dissipe aisément lorsqu'elle est soumise à un champ magnétique opposé, le champ coercitif qui est inférieur à $10^3 A.m^{-1}$ ($\mu_0 H_c > 12,5.10^{-4} T$) [10]. Ces substances présentent un cycle d'hystérésis étroit et possèdent une perméabilité très élevée, ce qui permet de les magnétiser et démagnétiser aisément. Ainsi on peut citer le fer, certains alliages de fer et nickel, ainsi que des ferrites $NiFe_2O_4$ comme exemples de matériaux ferromagnétiques doux [9].

Ces matériaux sont utilisés pour réaliser des électroaimants ou des circuits magnétiques de machines (moteurs, génératrices, transformateurs, ...).

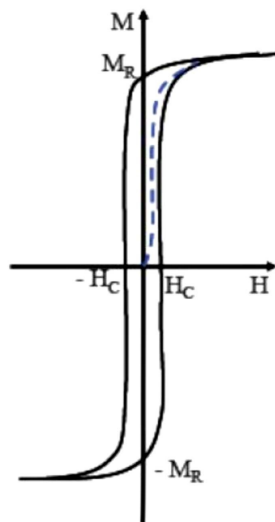


FIGURE 1.2 – Cycle d’hystérésis typique d’un matériau magnétique doux [11].

1.3 Magnétisme des métaux de transition et des terres-rares

Les métaux de transition et les terres rares jouent un rôle important dans l’étude du magnétisme en raison de la nature particulière de leurs électrons 3d et 4f, cette partie présente les caractéristiques magnétiques de ces deux familles de matériaux.

1.3.1 Les métaux de transition 3d

Les métaux de transition 3d (MT) se distinguent par leurs orbitales 3d qui sont partiellement remplies, avec deux sous-bandes de spin majoritaire et minoritaire qui présentent un décalage énergétique. Ce sont ces orbitales 3d qui sont à l’origine du magnétisme étant externes, elles sont fortement affectées par leur environnement atomique, ce qui entraîne une délocalisation des moments magnétiques.

Parmi les nombreuses caractéristiques des MT, l’une des plus remarquable est la capacité à montrer une aimantation spontanée sans la présence d’un champ magnétique extérieur en dessous d’une température critique, appelée température de Curie, T_C . Cette aimantation spontanée ne peut se manifester que si les moments magnétiques des atomes s’alignent collectivement [10]. L’aimantation due au moment magnétique de spin est définie par :

$$M_s = \mu_B(n_\uparrow - n_\downarrow) \quad (1.1)$$

Où \uparrow et \downarrow représente, respectivement, les nombres d’électrons de spin "up" (\uparrow) et "down" (\downarrow) et μ_B désigne le magnéton de Bohr qui caractérise le magnétisme d’origine électronique.

Dans un modèle simple (MottSlater) où l’hybridation entre les bandes s et d est négligée, la structure de bandes d’un métal ferromagnétique est constituée de :

- Deux ensembles de cinq bandes d (d_\uparrow, d_\downarrow) identiques, mais décalées l’une par rapport à l’autre d’un montant $\Delta\epsilon_d$ qui représente la fluctuation moyenne des potentiels d’échange.
- Deux bandes s_\uparrow et s_\downarrow , et également déplacées d’une quantité $\Delta\epsilon_d$ avec $\Delta\epsilon_d \ll \Delta\epsilon_d$.

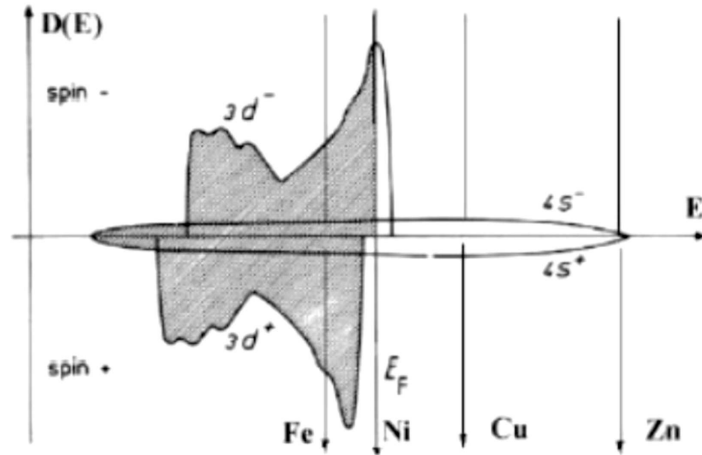


FIGURE 1.3 – Représentation schématique de la variation de la densité d'état $D(E)$ en fonction de l'énergie E pour les électrons $3d$ et $4s$. La zone grisée correspond au remplissage jusqu'au niveau de Fermi (celui-ci est représenté dans le cas du fer, du nickel, du cuivre et du zinc)[12].

L'origine du magnétisme des métaux de transition réside dans le remplissage différent des deux sous bandes d . On identifie des ferromagnétiques forts tels que le Cobalt (Co) et le Nickel (Ni), pour lesquels la bande d_{\downarrow} est saturée ($nd_{\uparrow} = 5$), et des ferromagnétiques de faible intensité comme le Fer (Fe), où aucune des deux bandes (d_{\uparrow}) ou (d_{\downarrow}) n'est remplie.

Une approche phénoménologique sur le ferromagnétisme révèle que la condition liée à sa manifestation est déterminée par la compétition entre :

- Le gain d'énergie d'interaction associé au déséquilibre entre les populations des deux types de spins (up et down) qui occupent les bandes $3d$ (principe de Pauli).
- L'augmentation de l'énergie cinétique associée au déplacement des électrons des bandes $3d_{\downarrow}$ vers les bandes $3d_{\uparrow}$.

La condition pour la manifestation du ferromagnétisme résultant de cette compétition est dit le critère de Stoner [13] à $T = 0K$, qui stipule qu'un gaz d'électrons est ferromagnétique si l'inégalité (1.2) est vérifiée :

$$I.N(\epsilon_F) > 1 \quad (1.2)$$

Où I est un coefficient qui décrit le couplage d'échange répulsif entre les électrons des bandes de spins opposés et $N(\epsilon_F) = N_{\uparrow}(\epsilon_F) + N_{\downarrow}(\epsilon_F)$ est la densité d'états au niveau de Fermi ϵ_F

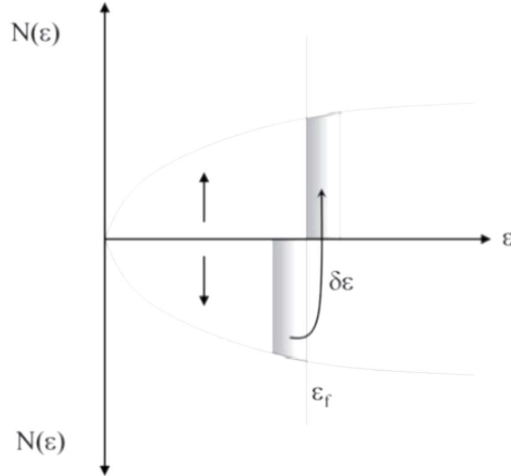


FIGURE 1.4 – Déplacement d'une quantité d'électrons de conduction depuis la bande de spin (\downarrow) vers la bande de spin (\uparrow)[10]

1.3.2 Les terres rares

La gamme de métaux des terres rares (TR) va du lanthane (La) au lutétium (Lu) et se rapporte au remplissage progressif de la couche électronique $4f$. Leur configuration électronique s'exprime ainsi : $[Xe]4f^n 5d^1 6s^2$, où $n = 0$ pour le lanthane et $n = 14$ pour le lutétium. A l'état métallique, les niveaux $5d$ et $6s$ s'hybrident pour générer une bande de conduction élargie contenant trois électrons. L'extension spatiale des orbitales $4f$ est extrêmement faible : les électrons de cette couche sont responsables du magnétisme des terres rares, ils restent assez séparés des autres orbitales et sont reliés entre eux par une interaction indirecte de type RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya, Yosida)[14] [15] [16]. On distingue deux familles de terres-rares en fonction du taux de remplissage de l'orbitale $4f$:

- Si n le nombre d'électrons $4f$ est inférieur à 7 (la couche est moins qu'à moitié remplie), on les appelle "terres-rares légères".
- Si la couche $4f$ est au moins à moitié remplie ($n \geq 7$), elles sont appelées "terres-rares lourdes".

Les terres-rares lourdes vont du gadolinium (Gd) ($n = 7$) (qui sera l'objet de notre étude) au lutétium (Lu)($n = 14$).

Hormis l'ytterbium (Yb), les terres-rares lourdes cristallisent dans une structure hexagonale compacte, dont les paramètres a et c diminuent au fur et à mesure du remplissage de la couche $4f$ en raison des corrélations électroniques.

Dans la couche $4f$, l'interaction coulombienne est plus forte que le couplage spin-orbite. On peut donc décrire l'apparition des moments magnétiques en deux phases distinctes :

- Couplage indépendant des moments cinétiques orbitaux l_i et des spins (s_i varie de 1 à n) des électrons $4f$, pour constituer un moment cinétique orbital total L et un spin total S :

$$L = \sum_i^n l_i \quad ; \quad S = \sum_i^n s_i \quad (1.3)$$

— Couplage spin-orbite entre L et S pour former le moment angulaire total $J = L + S$ auquel est lié le moment magnétique.

Les valeurs de L , S et J pour l'état le plus stable sont données très classiquement par les règles de Hund [10]. Elles favorisent l'orientation anti-parallèle des moments cinétiques orbitaux et de spin dans le cas des TR légères et l'orientation parallèle pour les TR lourde.

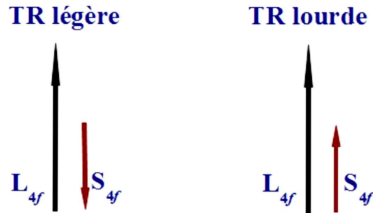


FIGURE 1.5 – Représentation schématique du couplage entre les moments cinétiques de spin et orbital 4 f des ions libres de terres-rares[11].

1.4 Propriétés magnétiques de composés intermétalliques

Les composés intermétalliques contenant des terres rares ($RT_n - A_m$) constituent une grande famille qui se subdivise en deux sous-catégories : celle où A possède un moment magnétique (Fe, Co,...) et celle où A n'en a pas (Al, Zn, Au,...). De nombreuses études ont été consacrées aux intermétalliques ($TR - A_2$). Par exemple, les composés ($TR - FE_2$) ont été et continuent d'être largement examinés pour leurs caractéristiques de magnétostriction géante, ce qui ouvre la route vers une multitude d'applications technologiques [10] [17].

Les intermétalliques constitués d'éléments qui sont principalement des terres rares et des métaux de transition affichent les caractéristiques magnétiques les plus remarquables. Ces substances combinent les propriétés provenant du magnétisme localisé de la couche 4f des terres rares avec celles liées au magnétisme itinérant des métaux de transition 3d. Grâce aux interactions entre leur moment orbital et le champ cristallin, les terres rares présentent une anisotropie prononcée. En ce qui concerne les métaux de transition, ils offrent une forte capacité d'aimantation et une température de Curie élevée, grâce aux importantes interactions d'échange entre les orbitales 3d. Cela est réalisable grâce au couplage ($MT - TR$) via les électrons de conduction des deux éléments. Les interactions électrons-électrons sont puissantes et engendrent une amplification du moment atomique. Le terme de couplage spin-orbite λ_{LS} crée un lien fort entre le moment orbital L et le moment de spin S [9].

1.4.1 Interactions d'échange magnétique

Certains matériaux présentent un ordre magnétique en dessous d'une température spécifique. Cet arrangement magnétique se distingue par une aimantation spontanée qui découle du couplage entre les moments magnétiques portés par les atomes. Ces derniers interagissent mutuellement pour produire divers phénomènes magnétiques comme le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme. L'explication du magnétisme des composés **MT-TR** se fait à l'aide d'un modèle qui considère trois types de couplages par échange :

- L'échange $3d-3d$ ($MT-MT$) entre les moments magnétiques du sous-réseau des atomes de métal de transition.
- L'échange $4f-4f$ ($TR-TR$) entre les moments magnétiques des atomes du réseau de terre-rare.
- L'échange $3d-4f$ ($MT-TR$) entre les moments magnétiques des deux sous-réseaux de métal de transition-terre rare.

Les interactions entre moments magnétiques sont responsables de l'alignement des sous-réseaux de spins, elles peuvent être décrites à partir de l'Hamiltonien effectif de Heisenberg [18]

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (1.4)$$

S_i et S_j représentent les vecteurs de spin des atomes i et j reliés respectivement aux moments magnétiques de ces mêmes atomes par les relations

$$m_i = -g_i \mu_B S_i \quad (1.5)$$

$$m_j = -g_j \mu_B S_j \quad (1.6)$$

Les interactions d'échange sont en général, proportionnelles à $1/r$ où r est la distance entre atomes; elle sont donc très intense mais à courte portée, ce qui implique qu'elles sont généralement prises en compte qu'entre premiers voisins. Le signe de l'intégrale d'échange renseigne directement sur la nature du couplage

- Si $J_{ij} < 0$, les moments magnétiques s'orientent antiparallèlement entre eux, et l'interaction est dite antiferromagnétique.
- Si $J_{ij} > 0$, les moments magnétiques s'orientent parallèlement entre eux afin de générer la configuration magnétique la plus stable énergétiquement, l'interaction est dite ferromagnétique.

1.4.1.1 Interactions d'échange dans les MT

Dans un métal de transition, le couplage entre deux moments de spins intrinsèques S_i et S_j est décrit par l'interaction d'échange, en raison du fort chevauchement des orbitales $3d$ qui sont étendues spatialement. Habituellement, cette intense interaction établit la température de transition des composés intermétalliques $TR - Fe_2$ [19].

Une analyse de la structure de bande du fer a montré que les structures non compactes (coordination locale faible) engendrent de fortes interactions ferromagnétiques alors que les structures compactes (coordination locale forte) conduisent à de faibles interactions ferromagnétiques, voire antiferromagnétiques [20].

Les interactions d'échange de fer sont ferromagnétiques pour une distance interatomique supérieure à $2,47$ sinon elles sont antiferromagnétiques [21].

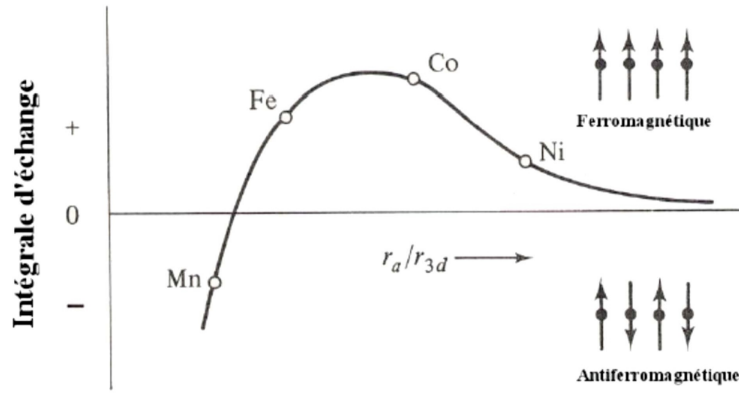


FIGURE 1.6 – Représentation schématique de la variation de l’interaction d’échange en fonction du rapport entre la distance entre 2 atomes (r_a) et le rayon de l’orbitale 3d (r_{3d}) [21].

1.4.1.2 Interactions d’échange dans les TR

L’effet de l’extension réduite de la couche $4f$, qui est une couche interne située autour des points atomiques à une distance inférieure aux distances interatomiques, entraîne la polarisation du spin ($5d$ et $6s$) de la bande de conduction ainsi que l’interaction indirecte entre les moments localisés $4f$. En d’autres termes, un spin S_i d’électrons $4f$ situé sur un atome i interagit avec les électrons de conduction et polarise leur spin. Cette polarisation des spins des électrons de conduction interagit ensuite avec le spin S_j d’un atome voisin j , créant ainsi une interaction indirecte entre les spins S_i et S_j . Il s’agit donc d’un mécanisme indirect qui a été introduit par Ruderman et Kittel en 1954, puis développé par Kasuya en 1956 et Yosida en 1957 d’où l’appellation d’interaction RKKY. L’intégrale d’échange caractérisant cette interaction est oscillante, amortie et alternativement positive et négative.

De façon générale, les fonctions d’onde des électrons $4f$ localisées conduisent à de faibles interactions d’échange et donc de faibles températures de Curie.

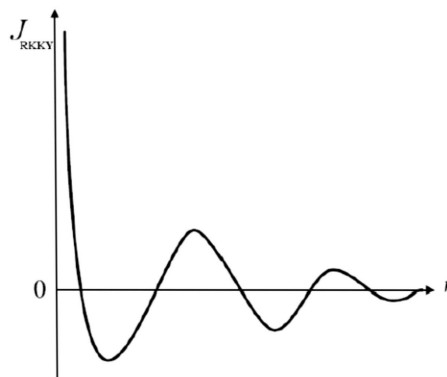


FIGURE 1.7 – Représentation schématique de l’oscillation de l’interaction d’échange de type RKKY entre deux moments magnétiques de TR distants de r [11].

1.4.1.3 Interactions d'échange entre MT et TR

L'interaction qui se produit entre les atomes de terres rares et les métaux de transition découle du couplage entre le moment magnétique des électrons mobiles $3d$ des MT et le moment magnétique localisé $4f$ des TR.

I. A. Campbell [22] a été le premier à mettre en évidence que l'interaction MT-TR est un processus indirect, distinct de l'interaction RKKY, car elle ne donnerait pas la possibilité d'expliquer correctement les résultats expérimentaux. Il a donc suggéré un mécanisme d'échange impliquant deux sortes d'interactions

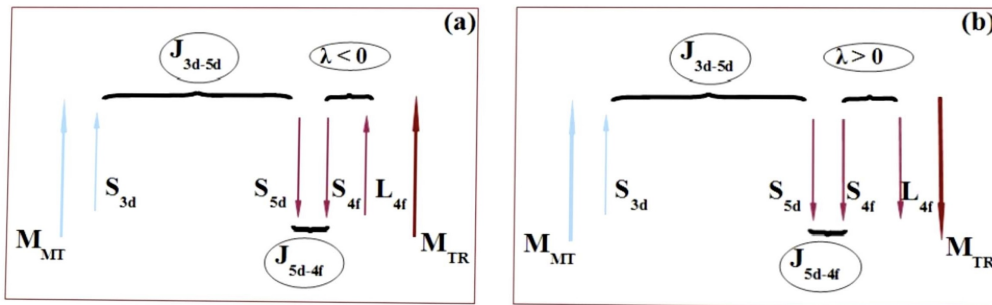


FIGURE 1.8 – Représentation schématique des interactions entre un atome de métal de transition MT et un atome de terre-rare TR (TR légère (a) et TR lourde (b)).[11]

- Une interaction locale intra-atomique de type ferromagnétique entre les moments $4f$ et $5d$ des terres rares contribue à renforcer le moment $5d$ de la terre rare. Toutefois, son effet serait négligeable sans une hybridation des bandes $5d$ de la terre rare et $3d$ du métal de transition car la bande $5d$ est quasiment vide et la bande $3d$ est quasiment pleine.
- Une interaction antiferromagnétique directe entre les spins $3d$ du MT et $5d$ de la TR. Elle repose sur l'hybridation des bandes de conduction $3d$ et $5d$ ainsi que sur la polarisation des électrons $5d$ de la terre-rare (génération d'un moment magnétique $5d$ induit). Selon I. A. Campbell, cette interaction étant dominante, elle contrôle ce couplage.

Des études sur les alliages cristallins MT-TR ont montré que l'interaction d'échange J_{MT-TR} croît et que le moment magnétique du MT diminue avec l'augmentation de la concentration en atomes de TR[23] [24]. Ce phénomène s'explique par l'accroissement de l'hybridation $3d - 5d$ lorsque la concentration en TR augmente, et a pour conséquences :

- De polariser les électrons $5d$ de la TR (existence d'un spin induit S_{5d}).
- De renforcer le couplage $3d - 5d$, donc d'augmenter l'interaction J_{MT-TR} .
- De diminuer le moment magnétique du MT et d'augmenter l'interaction J_{MTMT} .

Finalement, les moments magnétiques atomiques des TR sont orientés antiparallèlement à ceux des MT, ce qui caractérise une interaction antiferromagnétique. Pour conclure, dans les composés intermétalliques MT-TR, les moments magnétiques des atomes de terres rares sont organisés de manière ferromagnétique, tout comme ceux des atomes du métal de transition. Cependant, les moments magnétiques atomiques des terres rares manifestent un ordre antiferromagnétique par rapport à ceux du métal de transition.

1.5 Méthodes théoriques pour l'étude des structures MT/TR/MT

Les structures multicouches de type MT/TR/MT en générale et le structures Fe/Gd/Fe et Ni/Gd/Ni en particulier présentent la brisures de la symétrie de translation, notamment au niveau des interfaces. Cette spécificité empêche l'utilisation directe des méthodes classiques basées sur la périodicité cristalline. Ce chapitre présente les principales méthodes théoriques utilisées pour l'étude de ces systèmes, en mettant en avant la **méthode de raccordement** adoptée dans notre travail.

1.5.1 Diagonalisation directe

La diagonalisation directe consiste à construire et à diagonaliser la matrice hamiltonienne complète du système. Elle permet d'obtenir les états propres et les énergies sans hypothèses sur la périodicité. Cette méthode est simple dans son principe, mais elle devient rapidement coûteuse en ressources numériques pour des systèmes de grande taille. Elle est adaptée à l'étude de systèmes finis ou faiblement désordonnés [25].

1.5.2 Méthode des fonctions de Green

Les fonctions de Green permettent d'étudier la réponse du système à une excitation ponctuelle, tout en tenant compte des effets de surface, d'interface et de défauts. Cette méthode est très puissante pour calculer des densités d'états locales (LDOS), des spectres d'excitation ou la propagation des ondes de spin, même dans des systèmes non périodiques [26].

1.5.3 Méthode des matrices de transfert

La méthode des matrices de transfert repose sur la propagation des états d'une couche à l'autre à travers le matériau [27]. Elle est bien adaptée aux structures en couches successives, mais peut présenter des problèmes de stabilité numérique pour des systèmes épais ou en présence de fortes discontinuités magnétiques.

1.5.4 Calculs ab initio (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) permet de calculer les propriétés électroniques et magnétiques à partir des premiers principes. Bien que très précise, cette méthode est coûteuse en temps de calcul et peu pratique pour explorer de grandes gammes de paramètres physiques[28]. Elle est cependant utile pour extraire des paramètres effectifs (énergies d'échange, moments magnétiques, etc.).

1.5.5 Méthodes micromagnétiques

Les méthodes micromagnétiques (comme OOMMF ou MuMax3) simulent la dynamique de la magnétisation à l'échelle mésoscopique à l'aide de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert [29]. Elles sont particulièrement efficaces pour étudier les configurations de spin, les domaines magnétiques et la propagation des ondes de spin dans des géométries complexes.

1.5.6 Méthode de raccordement

La méthode de raccordement, ou **Phase Matching Field Theory (PMFT)**, est particulièrement bien adaptée à l'étude des systèmes hétérogènes avec interfaces nettes, comme les systèmes en couches Fe/Gd/Fe. Elle consiste à résoudre analytiquement ou semi-analytiquement les équations de mouvement dans chaque sous-système (Fe, Gd), puis à **raccorder** les solutions aux interfaces en imposant des conditions de continuité (par exemple, continuité des fonctions d'onde et de leurs dérivées ou du flux magnétique).

Cette méthode présente plusieurs avantages :

- Elle tient compte de la **rupture de l'invariance par translation** tout en conservant une approche analytique rigoureuse ;
- Elle permet de **traiter des systèmes de grande taille** sans nécessiter de ressources de calcul excessives ;
- Elle met en évidence les **conditions de résonance magnétique** et les **états magnoniques localisés** aux interfaces ;
- Elle est particulièrement utile pour extraire la **structure fine des modes d'excitation** et leurs localisations spatiales.

Dans ce travail, la méthode PMFT est utilisée pour déterminer les **états d'onde des magnons**, leur **dispersion** dans les multicouches, ainsi que les effets induits par la **variation d'épaisseur** ou de **couplage interfacial**.

Parmi l'ensemble des approches disponibles, **la méthode de raccordement (PMFT)** se distingue par sa capacité à fournir des résultats analytiques précis tout en restant souple vis-à-vis des propriétés physiques du système. Elle constitue donc un **outil théorique** central dans notre analyse des états magnoniques localisés et de la dynamique des ondes de spin dans ces structures.

Chapitre 2

Dispersion des ondes de spin dans le Fer et le Nickel

2.1 Introduction

L'étude des ondes de spin constitue un champ de recherche fondamental en physique du magnétisme. Ses enjeux restent aujourd'hui essentiels, tant pour la compréhension des mécanismes régissant les matériaux magnétiques, en particulier aux interfaces et aux échelles nanométriques, que pour le développement de technologies innovantes dans les domaines du traitement, du stockage et de la transmission de l'information.

2.2 Théorie des ondes de spin

La théorie des ondes de spin est considérée comme l'une des piliers fondamentaux de la physique du magnétisme. Bien que son importance demeure capitale aujourd'hui, cette théorie a été développée dans les années 50. Elle a connu un essor considérable depuis la mise au point de la théorie microscopique de l'antiferromagnétisme par Louis Néel dans les années 1930. De plus, la mécanique quantique et la physique de la matière condensée, notamment grâce aux travaux de Bloch-Heisenberg [30], qui ont joué un rôle déterminant dans l'explication de nombreux phénomènes, contribuant ainsi à une compréhension approfondie du comportement des matériaux magnétiques. Il convient également de noter que la notion d'ondes de spin a été introduite dès 1930 par le physicien Félix Bloch [31].

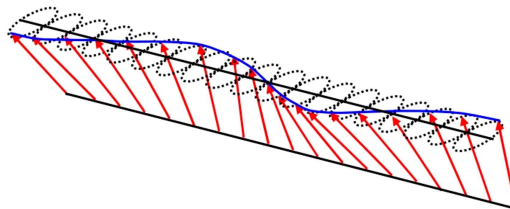


FIGURE 2.1 – Diagramme schématisé d'une onde de spin dans un matériau ferromagnétique [32].

2.3 Ondes de spin dans les matériaux magnétiques

Les ondes de spin constituent les modes propres d'excitation de faible énergie des systèmes magnétiques. Une onde de spin correspond à un état excité dans lequel le spin de chaque ion du réseau oscille autour de sa direction d'équilibre (excitation transverse), avec une énergie ou une fréquence uniforme [33]. Quand l'énergie d'une onde de spins est quantifié, l'unité d'énergie est appelée magnon.

Dans un premier temps, nous rappellerons, dans une approche semi-classique, la description des excitations magnétiques des systèmes infinis. Ensuite, nous exposerons le formalisme quantique.

2.3.1 Théorie classique des ondes de spin

La théorie classique des ondes de spin traite les spins comme des vecteurs classiques [34] dans le cadre du modèle de Heisenberg [35], pour décrire la précession collective des spins et déterminer la relation entre l'énergie de ces excitations et leur vecteur d'onde, notamment dans les systèmes périodiques et à basse température.

Ces ondes de spin sont décritent par l'Hamiltonien suivant

$$H = -2 \sum_{l,l'} J(l,l') \vec{S}_l \vec{S}_{l'} \quad (2.1)$$

"l" sont les sites atomiques contenant les vecteurs de spin (les nœuds d'un réseau de Bravais)

" S_l " est le spin occupant le site l,

" $S_{l'}$ " est le spin occupant le site l'.

Ce modèle est basé sur deux hypothèses. La première suppose que le champ moléculaire induit une transition vers une phase magnétique ordonnée. La deuxième consiste à ne considérer que de petites déviations autour de cet état de champ moyen [36].

2.3.2 Théorie semi-classique des ondes de spins

Dans le cas où l'on envisage une disposition régulière de spins, reliés par des interactions d'échange magnétique, alors l'énergie d'échange de l'un des spins de la couche "l" avec tous les sites adjacents est régie par l'équation (2.1). Qu'on peut réécrire comme suit :

$$H = -\vec{M}_l \vec{h}_{ex} \quad (2.2)$$

$$\vec{M} = g\mu_B \vec{S}_l \quad (2.3)$$

$$\vec{h}_{ex} = 2J/g\mu_B \sum_{l'} \vec{S}_{l'} \quad (2.4)$$

g est le facteur de Landé, μ_B est le magnéton de Bohr, \vec{M}_l est le moment magnétique de spin S_l , \vec{h}_{ex} est le champ créé par les spins voisins au site S_l .

L'équation du mouvement du moment cinétique $\hbar\vec{S}_l$ du spin S_l est donnée par l'Hamiltonien de Heisenberg qui se présente comme une théorie en champ moyen (qui exprime l'équation du mouvement du moment cinétique $\hbar\vec{S}_l$ du spin S_l), formulée de la manière suivante

$$H = -[\vec{M} \wedge \vec{h}_{ex}] \quad (2.5)$$

L'équation régissant le mouvement du moment magnétique de spin a été initialement proposée par Landau et Lifshitz, en 1935 [37]. Ils ont formulé cette équation tout en prenant compte des oscillations uniformes du moment magnétique de spin dans un matériau ferromagnétique isotrope. L'équation qui régit le mouvement du moment de spin \vec{S}_l est donnée par

$$\hbar \frac{d\vec{S}_l}{dt} = -[\vec{M} \wedge \vec{h}_{ex}] = -2J[\vec{S}_l \sum_{l'} \vec{S}_{l'}] \quad (2.6)$$

Dans le cas stationnaire, (pas d'onde de spin excitée) on obtient

$$\hbar \frac{d\vec{S}_l}{dt} = 0 \quad (2.7)$$

Mais dans le cas excité, la rotation des spins suivant l'axe (Oz) décrit un cône, alors on décompose \vec{S}_l , comme l'indique la figure 2.3.

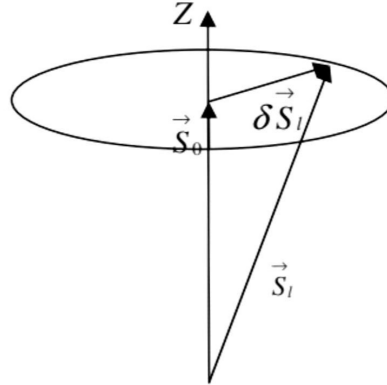


FIGURE 2.2 – Décomposition d'un vecteur de spin.

$$\vec{S}_l = \vec{S}_0 + \delta\vec{S}_l$$

$\delta\vec{S}_l$ est la déviation, $\delta\vec{S}_0$ est la composante de \vec{S}_l suivant l'axe (Oz) qu'on suppose indépendant du temps t.

De ce fait, l'équation (2.6) peut être exprimée comme suit

$$\hbar \frac{d\vec{S}_l}{dt} = -2J \sum_{l'} [(\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_l) \wedge (\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_{l'})] \approx -2J \sum_{l'} [(\delta\vec{S}_l - \delta\vec{S}_{l'}) \wedge \vec{S}_0] \quad (2.8)$$

A basse température, \vec{S}_l et $\vec{S}_{l'}$ sont très petits. D'où $\vec{S}_0 \approx S_0 \vec{k}$. Avec \vec{k} est le vecteur unitaire suivant l'axe (Oz), comme indiqué sur la figure 2.3.

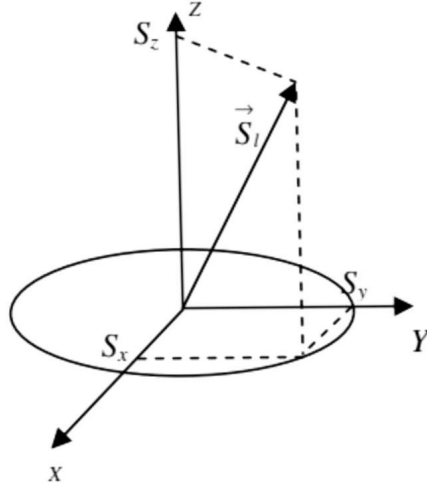


FIGURE 2.3 – Représentation des composantes d'un spin.

D'après cette figure on peut déduire que

$$(\delta \vec{S}_l)_x = (\vec{S}_l)_x, (\delta \vec{S}_l)_y = (\vec{S}_l)_y \text{ et } (\delta \vec{S}_l)_z = (\vec{S}_0)$$

En introduisant ces équations dans (2.8), on obtient

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_l)_x}{dt} = -2J \sum_{l'} [(\vec{S}_l)_x - (\vec{S}_{l'})_x] \wedge \vec{S}_0 \quad (2.9)$$

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_l)_y}{dt} = -2J \sum_{l'} [(\vec{S}_l)_y - (\vec{S}_{l'})_y] \wedge \vec{S}_0 \quad (2.10)$$

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_l)_z}{dt} = 0 \quad (2.11)$$

Et comme les excitations se propagent sous forme d'ondes planes progressive alors ; les solutions de ces équations prendront la forme suivante

$$\begin{aligned} (\vec{S}_l)_x(r, t) &= U \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \\ (\vec{S}_l)_y(r, t) &= V \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \end{aligned}$$

Tel que

\vec{k} le vecteur d'onde, \vec{r} le vecteur position de \vec{S}_l

On injecte ces solutions dans les équations (2.9) et (2.10) on obtient l'équation de dispersion de l'onde de spin (qui permet de tracer les courbes de dispersion des magnons) comme suit

$$\hbar\omega = 2JS_l\eta_l \left[1 - \frac{1}{Z_l} \sum_r e^{i(\vec{k}\vec{r})} \right] \quad (2.12)$$

Avec η_l le nombre de plus proches voisins aussi appelé le nombre de coordination, Z_l le nombre de proches voisins.

2.3.3 Théorie quantique des ondes de spins

Pour développer l'équivalent quantique de l'approche évoquée précédemment, il est indispensable de se baser sur des approximations issues du formalisme de la seconde quantification et des transformations de Holstein et Primakoff [38]. Ces auteurs ingénieurs ont été les premiers à travailler sur la théorie d'ondes de spin, en 1940, en incluant les interactions de type dipolaire et pseudo-dipolaire, ceci a engendré la naissance d'un nouveau et indispensable formalisme qui est devenu la base de plusieurs études théoriques sur les ondes de spins dans les matériaux ferromagnétiques [39-41]

Pour obtenir l'état fondamental de l'Hamiltonien de Heisenberg en utilisant les principes de la seconde quantification, il est nécessaire de le reformuler à l'aide des opérateurs de spin suivants

$$S^\pm = S^x \pm iS^y$$

En ce qui concerne ces opérateurs, ils seront décrits en utilisant les termes des opérateurs de création et d'annihilation de Bose a_l^+ , a_l^- . Les expressions reliant ces opérateurs sont dérivés dans le cadre des transformations de Holstein et Primakoff. En injectant les opérateurs de spin dans l'équation de l'Hamiltonien de spin mentionnée à l'équation (2.1), nous obtenons

$$H = -2 \sum_{l,l'} J(l,l') [S_l^z S_{l'}^z + \frac{1}{Z} (S_l^+ S_{l'}^- + S_l^- S_{l'}^+)] \quad (2.13)$$

Il existe une variété de transformations, permettant la construction de l'équivalent en opérateurs de Bose de l'Hamiltonien de spin. Parmi celle-ci, on trouve les transformations de Dyson [42], Maleev [43] et les transformations de Goldhirsch [32, 44-47]. Dans ce travail, nous allons opérer avec les transformations de Holstein-Primakoff suivantes

$$S_l^z = S - a_l^+ a_l \quad (2.14)$$

$$S_l^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_l^+ a_l}{2S}\right)^{1/2} a_l \quad (2.15)$$

$$S_l^- = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_l^+ a_l}{2S}\right)^{1/2} a_l^+ \quad (2.16)$$

Il est à noter que les valeurs propres de l'opérateur $a_l^+ a_l$ correspondent au nombre N d'ondes de spin excitées. Toutefois, ces formules demeurent inexactes quand les valeurs propres de l'opérateur $a_l^+ a_l$ dépassent $2S$, ou même pour celles-ci. La présence des radicaux dans les équations (2.15) et (2.16) introduit un défi en plus. Cela entraîne l'apparition d'une série de termes anharmoniques dans l'Hamiltonien. Pour éviter ce souci, une autre approximation s'avère indispensable : il s'agit de considérer que le spin S supérieur à 1 ($S > 1$). Cela nous donne la possibilité de développer les racines carrées sous forme de série, de cette manière

$$\left(1 - \frac{a_l^+ a_l}{2S}\right)^{1/2} = 1 - \frac{a_l^+ a_l}{4S} - \frac{(a_l^+ a_l)^2}{3S^2} - \dots \quad (2.17)$$

Ainsi on obtient un Hamiltonien composé de 2 contributions $H = H_0 + H_1$.

De telle sorte que

H_0 : contient les termes multiples de a_l et représente la somme des énergies des ondes de spin.

H_1 : contient des termes de degrés supérieurs à 2 et représente les interactions magnon-magnon.

Il est généralement possible d'utiliser uniquement la contribution H_0 . Ce choix est justifié par la condition fixée initialement ($S > 1$ correspond à l'approximation des ondes de spin à basse température). Il est important de noter que, dans cette situation, plus les valeurs des spins sont grandes, plus leur comportement se rapprochent des vecteurs classiques. Il est également essentiel de souligner que dans ce cas, les interactions entre magnons sont négligeables. Ce qui permet d'utiliser la transformation linéarisée de Holstein-Primakoff [32].

$$S_l^z = S - a_l^+ a_l \quad (2.18)$$

$$S_l^+ = \sqrt{2S} a_l \quad (2.19)$$

$$S_l^- = \sqrt{2S} a_l^+ \quad (2.20)$$

On peut appliquer ces transformations à divers modèles. Considérons un modèle ordonné de type ferromagnétique. En se limitant aux interactions d'échanges entre premiers voisins, avec un couplage isotrope qui respecte la symétrie de translation ($J_x = J_y = J_z = J$). On obtient l'Hamiltonien suivant

$$H = -J \frac{NZ}{2} S^2 - JS \sum_{l,l'} (-a_l^+ a_l - a_{l'}^+ a_{l'} + a_l^+ a_{l'} + a_{l'}^+ a_l) \quad (2.21)$$

Avec N le nombre total de spin et chaque spin possède Z spins premiers proches voisins. Un spin à la position \vec{r}_l repère son voisin à la position $\vec{r}_{l'}$ tel que

$$\vec{r}_{l'} = \vec{r}_l + \vec{r} \quad (2.22)$$

On injecte les transformations de Fourier suivantes

$$a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_l} a_{\vec{k}}^+ \quad (2.23)$$

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_l} a_{\vec{k}} \quad (2.24)$$

Ainsi on obtient l'Hamiltonien suivant

$$H = -J \frac{NZ}{2} S^2 + JSZ \sum_{\vec{k}} (1 - \gamma(\vec{k})) a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \quad (2.25)$$

$$\gamma(\vec{k}) = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.26)$$

La partie $E(\vec{k}) = JSZ(1 - \gamma(\vec{k}))$ de l'équation (2.25) représente l'énergie de l'onde de spin.

En résumé

Dans le cas où le champ extérieur ($B = 0$), on retrouve la relation de dispersion obtenue par la méthode classique (2.12).

2.4 Étude d'un système BCC ferromagnétique

La symétrie du réseau cristallin intervient dans le facteur $\gamma_{\vec{k}}$ avec la relation

$$\gamma_{\vec{k}} = 1/Z \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

Dans le cas d'un réseau cubique centré (BCC)

$$\gamma_{\vec{k}} = \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2)$$

D'où

$$\Omega = 8 - \cos(a/2) \cos(a/2) \cos(a/2) \quad (2.27)$$

Avec Ω la fréquence normalisée, tel que $\Omega = \frac{\hbar\omega}{2JZS_i}$

2.5 Étude d'un système FCC ferromagnétique

La symétrie du réseau cristallin intervient dans le facteur $\gamma_{\vec{k}}$ avec la relation

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

Dans le cas d'un réseau cubique à faces centrées (FCC)

$$\gamma_{\vec{k}} = 1/3 [\cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) + \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) + \cos(k_z a/2) \cos(k_x a/2)]$$

D'où

$$\Omega = 12 - 1/3 [\cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) + \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) + \cos(k_z a/2) \cos(k_x a/2)] \quad (2.28)$$

Avec Ω la fréquence normalisée, tel que : $\Omega = \frac{\hbar\omega}{2JZS_i}$

2.6 Résultats obtenues

Pour tracer les courbes ci-dessus nous avons utiliser les paramètres de mailles suivant :

Premier matériau : Fer

La structure électronique du Fer est : $[Ar]3d^6 4s^2$, son paramètre de maille est $a = 2,856 \text{ \AA}$ (Mesuré à 0K) [48], avec un rayon atomique $r_{\text{Fe}} = 1.27 \text{ \AA}$.

Deuxième matériau : Nickel

La structure électronique du Fer est : $[Ar]3d^8 4s^2$, son paramètre de maille est $a = 3,519 \text{ \AA}$ (Mesuré à 89K) [49], avec un rayon atomique $r_{\text{Ni}} = 124 \text{ pm}$.

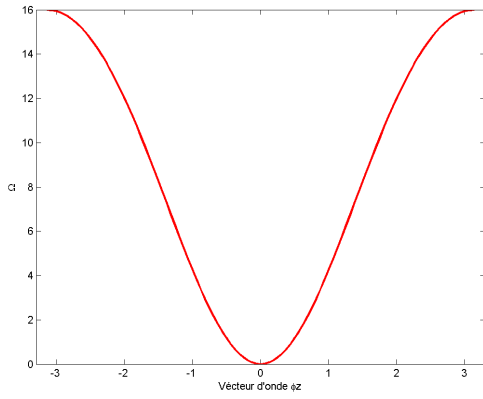


FIGURE 2.4 – Courbe de dispersion du Fe

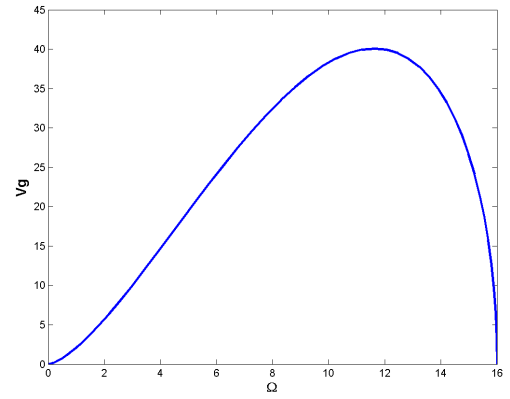


FIGURE 2.5 – Vitesse de groupe du Fe

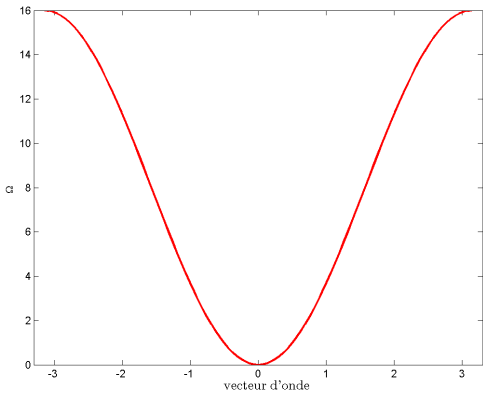


FIGURE 2.6 – Courbe de dispersion du Ni

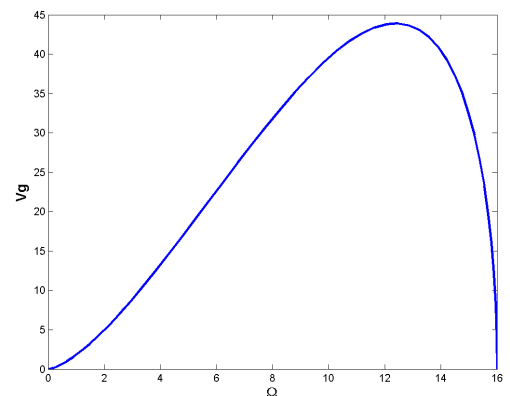


FIGURE 2.7 – Vitesse de groupe du Ni

2.6.1 Interprétation des résultats

Courbes de dispersion

Le modèle de Heisenberg explique efficacement les interactions d'échange des spins quantiques entre les premiers voisins sur un réseau cristallin ferromagnétique.

Dans ce cadre théorique, nous avons dérivé la relation de dispersion des magnons et tracé les courbes de dispersion correspondantes.

Les résultats obtenus révèlent l'existence d'un mode unique de magnons, décrit par le vecteur d'onde ϕ_z , lorsque celui-ci parcourt la première zone de Brillouin $[-\pi/a, +\pi/a]$. Ce mode présente un caractère acoustique ($\Omega \rightarrow 0$ quand $\phi_z \rightarrow 0$).

Vitesses de groupe

La vitesse de groupe des magnons, notée \vec{v}_g , est définie comme le gradient de la relation de dispersion par rapport au vecteur d'onde

$$\vec{v}_g = \nabla_{\vec{k}} \Omega(\vec{k})$$

où $\Omega(\vec{k})$ représente la relation de dispersion des excitations magnétiques dans le matériau.

La vitesse de groupe décrit la propagation spatiale de l'énergie magnonique. Elle est comparable à la vitesse de déplacement d'un paquet d'ondes dans un milieu dispersif.

Une vitesse de groupe élevée traduit des interactions **d'échange fortes** entre spins voisins. Elle est généralement associée à une **rigidité magnétique** importante, c'est le cas des matériaux ferromagnétiques tels que le fer (Fe) ou le nickel (Ni).

Dans notre cas, la vitesse de groupe devient nulle lorsque le vecteur d'onde tend vers zéro, c'est-à-dire au centre de la zone de Brillouin ($\vec{k} \rightarrow 0$). Cela correspond à un mode **acoustique**, caractérisé par une fréquence qui tend vers zéro ($\Omega \rightarrow 0$). Ce comportement est typique des systèmes **ferromagnétiques isotropes**.

En présence d'anisotropie, la vitesse de groupe **dépend** de la direction du vecteur d'onde. Cette anisotropie peut révéler l'existence d'**interactions spécifiques**, comme l'interaction de **Dzyaloshinskii-Moriya** ou le **couplage spin-orbite**, qui modifient la propagation des ondes de spin dans différentes directions.

La maîtrise de la vitesse de groupe est essentielle dans le domaine de la spintronique. En effet, une vitesse élevée permet un transport de spin efficace et **sans dissipation**, ce qui ouvre la voie à l'utilisation des magnons dans des dispositifs logiques ou de traitement d'information.

Du point de vue thermodynamique, la vitesse de groupe influence directement la capacité calorifique magnétique, en particulier à basse température.

Les figures 2.5 et 2.7 montrent que la vitesse de groupe est maximale pour $k = \frac{\pi}{2a}$ et devient nulle aux bords de la zone de Brillouin, c'est-à-dire pour $k = \pm \frac{\pi}{a}$.

Une analyse plus détaillée révèle une croissance progressive de la vitesse de groupe jusqu'à un pic situé autour de $\phi_z = 12$, suivie d'une chute brutale. Ce comportement indique l'existence d'un vecteur d'onde optimal pour lequel le **transport d'énergie** par les ondes de spin est **maximal**. En dehors de cette valeur optimale, le transfert devient moins performant.

Ce résultat met en évidence la nature dispersive du système magnétique étudié et **explique** le comportement des ondes de spin dans des milieux ferromagnétiques structurés.

Chapitre 3

Etats localisés des ondes de spin dans Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni

3.1 Introduction

L'étude des systèmes magnétiques Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni est compliquée et se distingue largement de celle d'un système en régime de propagation dans le volume. En effet, les interfaces peuvent changer radicalement les caractéristiques magnétiques d'un matériau. Leur étude soulève des problématiques théoriques difficiles à surmonter, principalement liées à la rupture de symétrie. Par conséquent, il est nécessaire de trouver des approches favorables à leur étude. Nous avons adapté l'approche proposée par R. Landauer et développée par M. Büttiker, initialement conçue pour décrire le transport électrique dans les systèmes mésoscopiques. Nous l'avons adaptée pour déterminer les états localisés de spin à travers les systèmes étudiés dans ce mémoire.

3.2 Principe de la méthode utilisée

Pour traiter le problème de la dispersion des magnons en présence d'interfaces antiferromagnétiques. dans les systèmes Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni, nous avons eu recours à la méthode analytique dite de raccordement, qui consiste à décrire le mouvement de précession des spins par un nombre fini d'équations [50]; elle est basée sur le raccordement des états localisés créés par les défauts et les modes évanescents de volume. Son application exige que le système soit divisé en trois zones distinctes voir figure 3.1

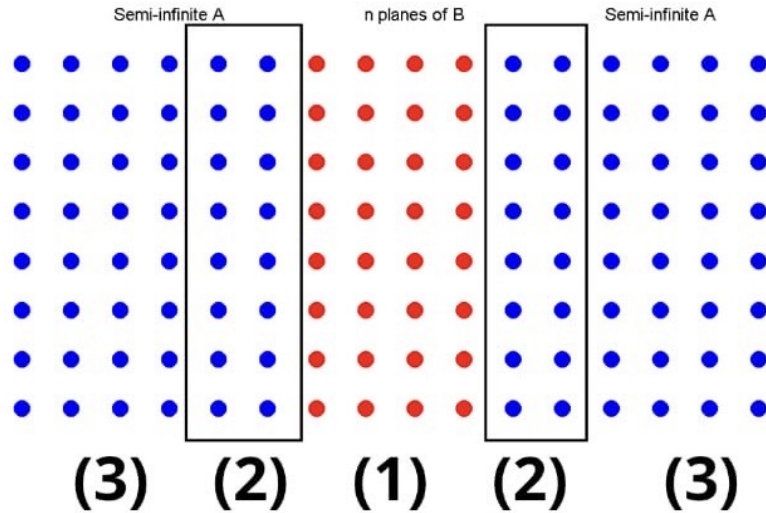


FIGURE 3.1 – Représentation schématique d’un défaut magnétique couplant deux volumes ferromagnétiques selon le concept de la méthode de raccordement.

- **Zones parfaites (3)** : c’est la région loin des interfaces, dans notre cas c’est fer ou le Nickel, elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle. Elle permet de tracer les courbes de dispersion en volume données au chapitre 2, de définir les modes propagants et les modes évanescents du système. Ces solutions sont obtenues par la méthode de Gagel [51] qui consiste à linéariser le système en augmentant la base des vecteurs propres du système parfait.
- **Zone de défaut (1)** : c’est la région qui renferme les plans atomiques de Gadolinium. Elle est la partie responsable de la perte de la périodicité du réseau. Elle permet d’obtenir la matrice dynamique du système perturbé, en écrivant les équations de mouvement de précession des spins de la zone (1) et celles des atomes de la zone (2) dite de raccordement, on obtient une matrice rectangulaire $D(m,n)$ de dimension $(m \otimes n)$. Avec m est le nombre de spins dans la zone (1) et n est le nombre de spins dans la zone (1) et ceux de la zone (2).
- **Zone de raccordement (2)** : c’est la région intermédiaire entre la région parfaite et la région de défaut. Elle permet, dans la modélisation théorique, de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut, notamment les plans de Gd, aux états de précession évanescents de la zone parfaite (Ni ou Fe). On définit alors une matrice $R(n,m)$, dite de raccordement, qui relie analytiquement les déplacements précessionnels de spins appartenant à la zone de défaut aux modes évanescents des deux guides d’ondes parfaits situés de part et d’autre du gadolinium.

3.3 Définition de la matrice dynamique du système perturbé

3.3.1 Définition de la matrice défaut

Cette matrice trouve son origine dans l'écriture des équations de mouvement de précession des spins des sites de la zone de défaut et des deux zones de raccordement, en utilisant l'équation suivante :

$$H = - \sum_{l'} J_{ll'} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l'} - \sum_l D_l (S_l^z)^2 - Bg\mu_B \sum_l S_l^z \quad (3.1)$$

Cette dernière permet d'obtenir une matrice rectangulaire $D(m \otimes n)$.

3.3.2 Définition de la matrice de raccordement

Pour obtenir la matrice de raccordement, nous devons définir deux espaces avec deux bases distinctes $\{R^+\}$ et $\{R^-\}$; la première sera utilisée pour l'étude de la précession des spins se trouvant à droite des plans de Gd, et la deuxième sera utilisée pour l'étude de la précession de ceux se trouvant à gauche.

Pour les vecteurs de spins appartenant à la région de droite, on peut écrire leurs amplitudes de précession comme suit

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

Pour un spin de la région gauche, les amplitudes de précession sont données par la relation :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(i) Z_i^{-n_x} R_i^- + \sum_{i=1}^1 Z_i^{-n_x} A(\alpha, i') R_{i'}^- \quad (3.3)$$

Avec R^- est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R^-\}$ de l'espace des phases, R^+ est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans la base $\{R^+\}$, α est l'une des trois directions (Ox), (Oy) ou (Oz), A et A' sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

On note par $|u\rangle$ le vecteur de précession des spins de la zone perturbée. On peut le décomposer en deux parties :

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

La partie $|irr\rangle$ est constituée des amplitudes de précession des sites irréductibles formants la zone (1), notamment ceux de Gd. La partie $|rac\rangle$ est composée des amplitudes de précession des deux zones (2) de raccordements entre autres ceux de Fe ou de Ni.

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = [R] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

$[R]$ est appelée matrice de raccordement, sa dimension est $(n \otimes m)$.

Le produit de la matrice D par la matrice R donne la matrice dynamique carrée du système perturbé $S(m \otimes m)$.

$$[D(m \otimes n)] \cdot [R(n \otimes m)] \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} = [S(m \otimes m)] \begin{bmatrix} |\text{irr}\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

3.4 Définition des grandeurs physiques

Compte tenu de la brisure de symétrie suivant la direction (Ox), l'onde de spin peut être atténuée en rencontrant le défaut. De ce fait, il serait commode de relier les vecteurs de précession de deux spins adjacents par un facteur d'atténuation Z , tel que

$$u_\alpha(n_x \pm 1, n_y, n_z) = Z^{\pm 1} u_\alpha(n_x, n_y, n_z) \quad (3.7)$$

Avec Z et $1/Z$ sont appelés facteurs de phases.

Pour décrire la diffusion en présence des interfaces, nous avons besoin des modes propagants et des modes évanescents. On peut les déterminer par la méthode du déterminant ou la méthode de l'augmentation de la base [52].

3.4.1 Définition des états localisés de spins dans un système

Les états localisés induits par l'existence d'un défaut dans Fe/ n Gd/Fe et dans Ni/Gd/Ni seront déterminés par les solutions de l'équation suivante

$$\det([S(m \otimes m)]) = 0 \quad (3.8)$$

3.5 Systèmes en sandwichs étudiés

Dans cette étude, nous considérons deux systèmes ferromagnétiques sandwichs distincts. Le premier est constitué de fer (Fe), dans lequel une couche de gadolinium (Gd), composée de n plans atomiques, avec n variant de 5 à 8, formant ainsi une structure de type Fe/ n Gd/Fe. Le second système, est construit selon le même principe, ou le fer est remplacé par le nickel (Ni), conduisant à une structure Ni/ n Gd/Ni, comme l'indique la figure 3.1 (ou la partie en bleu représente le Fe ou le Ni est la partie en rouge représente le Gd).

Le gadolinium, terre rare 4f, présente un moment magnétique élevé mais un couplage d'échange plus faible que celui du Fe et de celui de Ni. Son insertion dans Fe ou Ni crée une barrière magnétique et structurale, susceptible de modifier la propagation des excitations de spin (magnons).

Pour réaliser les simulations numériques de manière précise, nous avons utilisé les valeurs spécifiques de l'aimantation intrinsèque 'spin' pour les atomes de Fer (Fe), de Nickel(Ni) et de Gadolinium (Gd).

Nous avons également utilisé les paramètres qui décrivent comment ces atomes interagissent magnétiquement entre eux c'est-à-dire les 'constantes d'échange "J" pour les paires Fe-Fe, Gd-Gd, Ni-Ni, Ni-Gd et Fe-Gd fournie dans des études précédentes [53] [54] [55].

Premier matériau Fe/ n Gd/Fe

$$J_{Fe-Fe} = 130.10^{-23} \text{ Joule}$$

$$S_{Fe} = 1$$

$$J_{Gd-Gd} = 5,8.10^{-23} \text{ Joule}$$

$$S_{Gd} = 7/2$$

$$J_{Fe-Gd} = -98.10^{-23} \text{ Joule}$$

Toutes ces valeurs ont été prise de [55]

Deuxième matériau Ni/Gd/Ni

$$J_{Ni-Ni} = 0,206nRy = 2,80mev = 44,86.10^{-23} \text{ Joule [53]}$$

$$S_{Ni} = 1[53]$$

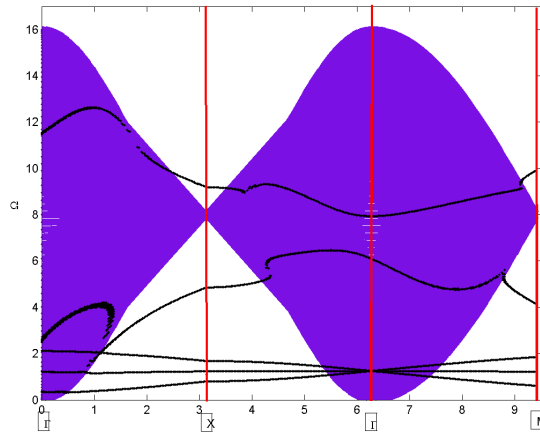
$$J_{Gd-Gd} = 0,48mev = 7,69.10^{-23} \text{ Joule [54]}$$

$$S_{Gd} = 7/2 [54]$$

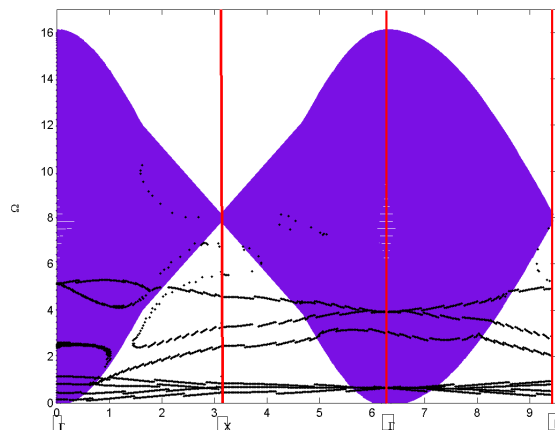
Pour l'intégrale d'échange J_{Ni-Gd} nous avons fait une moyenne d'ou nous avons obtenue la valeur $J_{Ni-Gd} = \frac{(7,69+44,86)}{(2*44,86)} = 0,58$

3.5.1 Résultats obtenus

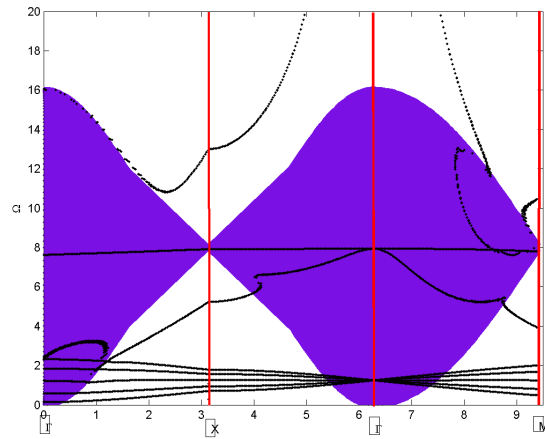
Premier matériau : Fer



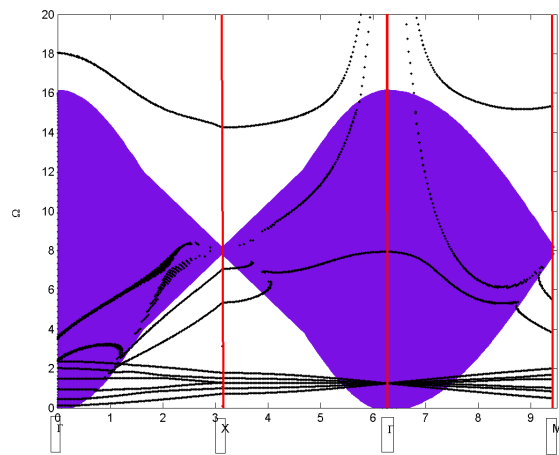
(a)



(b)



(c)

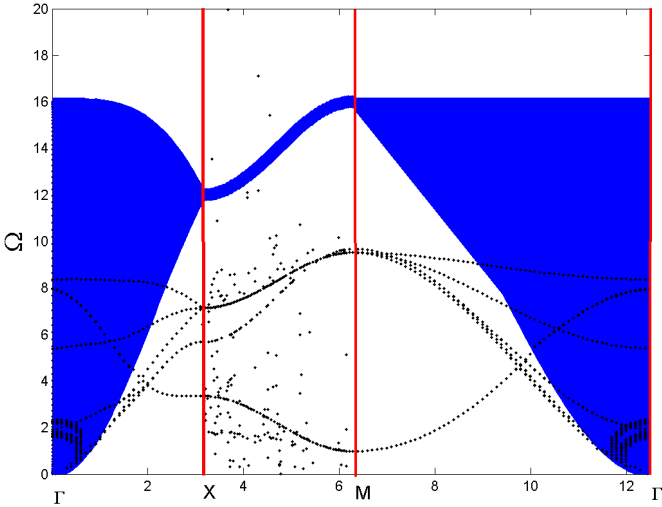


(d)

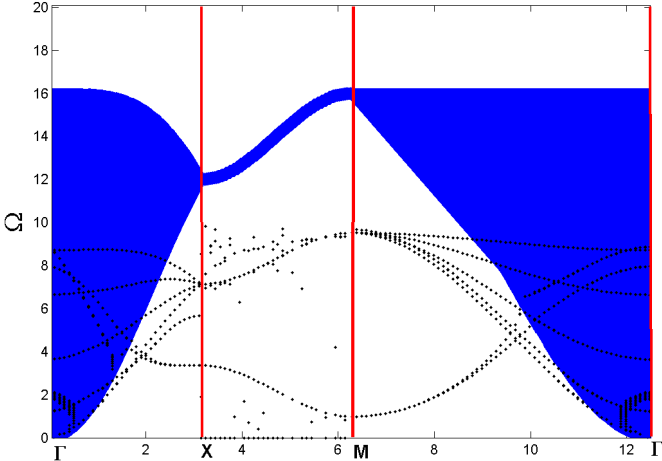
FIGURE 3.2 – Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du Fer (réseau cubique centré).

(a) $n=5$, (b) $n=6$, (c) $n=7$, (d) $n=8$ tel que n est le nombre de plans de Gd insérer dans le Fer .

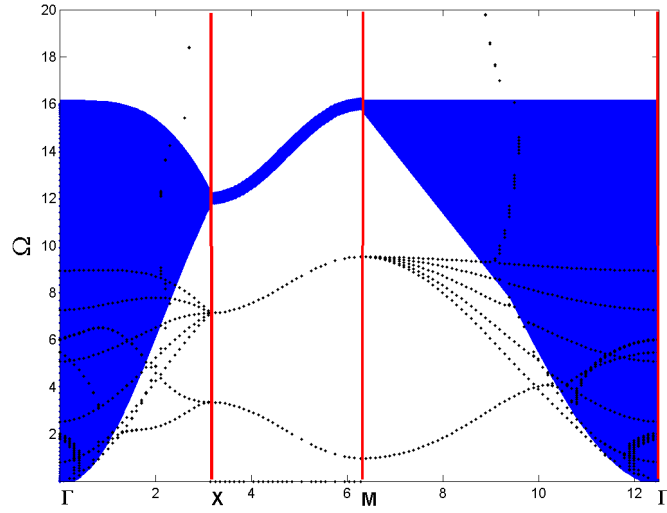
Deuxième matériau : Nickel



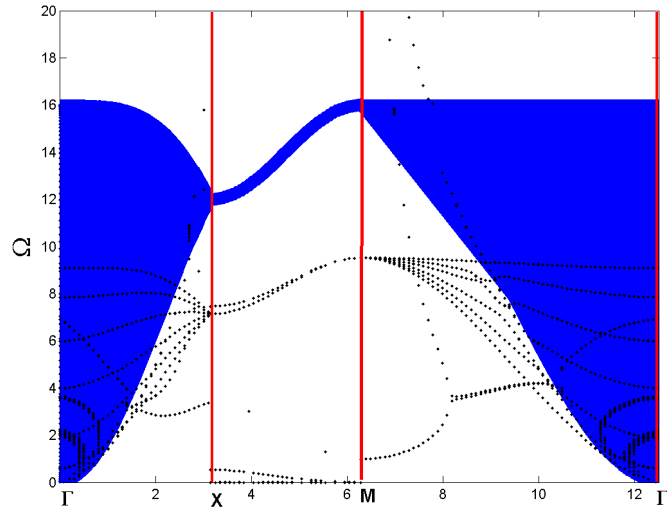
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 3.3 – Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d’onde parfait du Nickel (réseau cubique à faces centrées).

(a) $n=5$, (b) $n=6$, (c) $n=7$, (d) $n=8$ tel que n est le nombre de plans de Gd insérer dans le Nickel.

3.5.2 Interprétation des résultats obtenus

La figure 3.2 présente les états localisés obtenus pour les structures Fe/ n Gd/Fe, tandis que la figure 3.3 illustre ceux correspondant aux structures Ni/ n Gd/Ni. Dans les deux cas, (a) correspond à $n = 5$, (b) à $n = 6$, (c) à $n = 7$ et (d) à $n = 8$ plans atomiques de gadolinium.

Dans la structure Fe/ n Gd/Fe, la figure 3.2 révèle plusieurs états magnoniques localisés, identifiés par des points noirs situés dans les gaps du spectre de volume (en violet). Ces états apparaissent principalement à deux plages de fréquence : basse et intermédiaire/élevée. À basse fréquence, les états localisés faiblement dispersifs se situent dans le premier gap. Ces modes, typiques des états de type Tamm, sont confinés près des interfaces Fe/Gd en raison du couplage antiferromagnétique et du contraste entre les paramètres d’échange de Fer et celui de l’interface.

La discontinuité magnétique à l'interface piège efficacement les ondes de spin, créant des états fortement localisés. À plus haute fréquence, d'autres états faiblement dispersifs émergent dans un second gap, correspondant cette fois à des modes confinés au sein de la couche de Gd. Le contraste Fe/Gd provoque une réflexion des ondes de spin, générant des résonances internes similaires aux modes propres du Fe, mais modifiés par les conditions aux limites. Par ailleurs, certains états isolés, apparaissant sous forme de points dispersés, pourraient résulter de modes quasi-localisés ou d'effets de désordre, bien que leur stabilité reste limitée.

Dans ce type de systèmes trois types d'états coexistent notamment les modes **interfaciaux** à basse fréquence, dominés par le couplage Fe/Gd ; les modes **confinés dans le Gd** à fréquence élevée, liés au piégeage magnétique ; et des états **dispersés**, plus sensibles à la géométrie du système. La localisation dépend ainsi fortement de la fréquence ; les basses fréquences privilégient les états interfaciaux, tandis que les hautes fréquences activent des modes volumiques dans le Gd.

Lorsque l'épaisseur de Gd augmente ($n = 7, 8$), de nouveaux états apparaissent dans le diagramme de bandes. Entre les points M et Γ , des alignements quasi verticaux de points révèlent des modes fortement localisés dans le Gd, avec un vecteur d'onde quasi constant mais une fréquence croissante. Ces états, caractéristiques d'un puits magnétique, résultent du faible paramètre d'échange du Gd, qui favorise le confinement. Comparant différentes épaisseurs, on observe que les couches minces ($n = 5, 6$) présentent surtout des **modes de Tamm/Shockley interfaciaux**, tandis que les couches épaisses ($n = 7, 8$) développent des **résonances de cavité** dans le Gd. Enfin, des **états dispersés**, souvent situés près des bords de bande, reflètent l'influence des interférences magnétiques.

Les courbes de dispersion des magnons dans les structures sandwiches Ni/nGd/Ni la figure 3.3 présentent des **caractéristiques distinctes** de celles observées dans les systèmes Fe/nGd/Fe la figure 3.2. Cette différence s'explique par le faible paramètre d'échange du nickel, ce qui réduit le contraste d'échange avec le gadolinium. Il en résulte une **diminution de la largeur des bandes de volume** ainsi qu'une **modification de la nature et de la densité des états localisés**. Le Gd conserve néanmoins son rôle de couche à faible échange, agissant comme une **barrière magnétique** ou un **puits de potentiel** pour les ondes de spin.

Pour des couches minces de Gd ($n = 5$ et 6), les états localisés sont principalement de type **interfacial**, confinés à proximité des interfaces Ni/Gd. Ils présentent une faible dispersion et un comportement typique des modes de type **Tamm ou Shockley**. Lorsque l'épaisseur de la couche de Gd augmente ($n = 7$ et 8), on observe l'apparition d'états supplémentaires à haute fréquence, caractérisés par une dispersion quasi nulle, traduisant la présence de modes de **résonance confinés** dans la couche de Gd.

Comparées aux structures Fe/nGd/Fe, les structures Ni/nGd/Ni présentent un nombre réduit d'états localisés en raison du **contraste d'échange moins prononcé**. On note toutefois la persistance d'états **hybrides** ou **quasi-localisés**, sensibles à la géométrie, au couplage interfacial et aux conditions aux limites. Cela traduit une **interaction plus complexe entre les interfaces et le cœur de la structure**. Une analyse comparative détaillée des états localisés pour les systèmes Fe/Gd/Fe et Ni/Gd/Ni est présentée dans le tableau ci-dessous.

Les résultats obtenus met en évidence l'influence conjointe du choix des matériaux, de l'épaisseur de la couche de Gd et sur les caractéristiques magnoniques des systèmes sandwiches.

Aspect	Ni/nGd/Ni	Fe/nGd/Fe
Nature des états localisés	Bien définis, nombreux	Peu nombreux, souvent hybrides
Fréquences dominantes	Moyennes à hautes (10–16 Ω)	Basses (0–10 Ω)
Évolution avec les plans	Nouveaux modes nets	Évolution lente, modes diffus
Confinement magnonique	Fort (bons pièges)	Moins fort (couplage étendu)

Le nickel (Ni), par son paramètre d'échange plus faible, engendre des spectres **moins riches** que ceux du fer (Fe), mais permet néanmoins **l'apparition de phénomènes de localisation exploitables** dans des dispositifs magnoniques à faible contraste d'échange.

Bibliographie

- [1] W. H. MEIKLEJOHN et C. P. BEAN, “New magnetic anisotropy”, *Physical review* **102**, 1413 (1956).
- [2] L. NÉEL, “Étude théorique du couplage ferro-antiferromagnétique dans les couches minces”, in *Annales de Physique*, t. 14, 2 (1967), p. 61-80.
- [3] W. KUCH, L. I. CHELARU, F. OFFI, J. WANG, M. KOTSUGI et J. KIRSCHNER, “Tuning the magnetic coupling across ultrathin antiferromagnetic films by controlling atomic-scale roughness”, *Nature materials* **5**, 128-133 (2006).
- [4] T. HAUET, “Décalage d’échange et magnéto-résistances dans des bicouches à base de ferromagnétiques amorphes couplés par échange”, thèse de doct. (Université Henri Poincaré-Nancy 1, 2006).
- [5] F. BLOCH, “Zur theorie des ferromagnetismus”, *Zeitschrift für Physik* **61**, 206-219 (1930).
- [6] R. SKOMSKI et J. COEY, “Giant energy product in nanostructured two-phase magnets”, *Physical Review B* **48**, 15812 (1993).
- [7] D. SUESS, T. SCHREFL, S FÄHLER, M. KIRSCHNER, G. HRKAC, F. DORFBAUER et J. FIDLER, “Exchange spring media for perpendicular recording”, *Applied Physics Letters* **87** (2005).
- [8] R. H. VICTORA et X. SHEN, “Composite media for perpendicular magnetic recording”, *IEEE Transactions on Magnetism* **41**, 537-542 (2005).
- [9] K. YOUNSI, “Etude expérimentale et théorique des propriétés structurales et magnétiques des nanomatériaux Pr (Co, Fe) 3”, thèse de doct. (Université Paris-Est, 2011).
- [10] C KITTEL, “Introduction a la Physique de l’Etat Solide”, Dunod Université, France (1972).
- [11] S. DJEDAI et P. E. BERCHE, “Étude des propriétés magnétiques des superréseaux DyFe₂/YFe₂ par la méthode monte carlo”, (2015).
- [12] J. BIGOT, *Alliages métalliques amorphes* (Ed. Techniques Ingénieur, 1996).
- [13] E. C. STONER, “Collective electron ferromagnetism”, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **165**, 372-414 (1938).
- [14] M. A. RUDERMAN et C. KITTEL, “Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons”, *Physical Review* **96**, 99 (1954).
- [15] T. KASUYA, “A theory of metallic ferro-and antiferromagnetism on Zener’s model”, *Progress of theoretical physics* **16**, 45-57 (1956).
- [16] K. YOSIDA, “Magnetic properties of Cu-Mn alloys”, *Physical Review* **106**, 893 (1957).
- [17] A. CLARK, “Magnetostrictive RFe₂ intermetallic compounds”, *Handbook on the physics and chemistry of rare earths* **2**, 231-258 (1979).
- [18] W HEISENBERG, F BLOCH, E. STONER, F. DYSON, F. DYSON, L. LANDAU et E. LIFSHITZ, “Thermodynamic Behavior of an Ideal Ferromagnet”, *Z. Physik* **49**, 619-1230 (1928).

- [19] N. H. DUC, “Intersublattice exchange coupling in the lanthanide-transition metal intermetallics”, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths **24**, 339-398 (1997).
- [20] L. NÉEL, “Propriétés magnétiques de l’état métallique et énergie d’interaction entre atomes magnétiques”, in Annales de physique, t. 11, 5 (1936), p. 232-279.
- [21] É. d. T. de LACHEISSERIE et M. CYROT, *Magnétisme : Matériaux et applications. II*, t. 2 (L’Editeur : EDP Sciences, 2000).
- [22] I. CAMPBELL, “Indirect exchange for rare earths in metals”, Journal of Physics F : Metal Physics **2**, L47 (1972).
- [23] P HANSEN, C CLAUSEN, G MUCH, M ROSENKRANZ et K WITTER, “Magnetic and magneto-optical properties of rare-earth transition-metal alloys containing Gd, Tb, Fe, Co”, Journal of applied physics **66**, 756-767 (1989).
- [24] N. HEIMAN, K. LEE, R. I. POTTER et S KIRKPATRICK, “Modified mean-field model for rare-earth-iron amorphous alloys”, Journal of Applied Physics **47**, 2634-2638 (1976).
- [25] R. M. NOACK et S. R. MANMANA, “Diagonalization-and numerical renormalization-group-based methods for interacting quantum systems”, in AIP Conference Proceedings, t. 789, 1 (American Institute of Physics, 2005), p. 93-163.
- [26] N. BAADJI, “Étude ab-initio de magnétisme et du transport électronique dans les systèmes hybrides (fer/semi-conducteur/fer)”, thèse de doct. (Université Louis Pasteur (Strasbourg)(1971-2008), 2006).
- [27] P BRUNO, “Theory of interlayer magnetic coupling”, Physical Review B **52**, 411 (1995).
- [28] I. ALKORTA et al., “Ab initio hybrid DFT-GIAO calculations of the shielding produced by carbon-carbon bonds and aromatic rings in 1 H NMR spectroscopy”, New Journal of Chemistry **22**, 381-385 (1998).
- [29] L. HALPERN et S. LABBÉ, “La théorie du micromagnétisme. Modélisation et simulation du comportement des matériaux magnétiques”, Matapli **66**, 77-92 (2001).
- [30] O. FRUCHART, “L’électronique de spin-Un renouveau de la science et de la technologie du magnétisme”, Reflets de la physique, 4-5 (2009).
- [31] A VATERLAUS, T BEUTLER, D GUARISCO, M LUTZ et F MEIER, “Spin-lattice relaxation in ferromagnets studied by time-resolved spin-polarized photoemission”, Physical Review B **46**, 5280 (1992).
- [32] O. NAFA, “Excitations collectives de spins dans les couches minces ferromagnétiques”, thèse de doct. (Universite Mouloud Mammeri, 2014).
- [33] S PETIT, “Les ondes de spin”, Ecole thématique de la Société Française de la Neutronique **10**, 449-463 (2010).
- [34] C KITTEL, P MCEUEN, J DION et P MCEUEN, “Physique de l’état solide : Cours et problèmes, Dunod (2005)”, BIBLIOGRAPHIE BIBLIOGRAPHIE (2007).
- [35] S PETIT, “Onde de Spin, Institut Rayonnement de Saclay”, EDP Sciences **10**, 449-463 (2010).
- [36] R. CHALLALI, “Spectres magnoniques associés aux surfaces et aux interfaces entre structures cubiques ferromagnétiques”, thèse de doct. (UNIVERSITE MOULOUDE MAMMERI DE TIZI-OUZOU, 2024).
- [37] B. BOURAHLA, “Thèse de Doctorat”, thèse de doct. (Universite Mouloud Mammeri, 2007).
- [38] T. HOLSTEIN et H. PRIMAKOFF, “Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet”, Physical Review **58**, 1098 (1940).

- [39] J. G. HIRSCH, O. CASTANOS, R. LÓPEZ-PENA et E. NAHMAD-ACHAR, “Virtues and limitations of the truncated Holstein–Primakoff description of quantum rotors”, *Physica Scripta* **87**, 038106 (2013).
- [40] A. MAKHANKOV et V. MAKHANKOV, “Spin Coherent States, Holstein-Primakoff Transformations for Heisenberg Spin Chain Models, and Status of the Landau-Lifshits Equation”, *physica status solidi (b)* **145**, 669-678 (1988).
- [41] A. KREISEL, F. SAULI, L. BARTOSCH et P. KOPIETZ, “Microscopic spin-wave theory for yttrium-iron garnet films”, *The European physical journal B* **71**, 59-68 (2009).
- [42] F. J. DYSON, “General theory of spin-wave interactions”, *Physical review* **102**, 1217 (1956).
- [43] S. MALEEV, “Scattering of slow neutrons in ferromagnets”, *Sov. Phys. JETP* **6**, 776 (1958).
- [44] I GOLDHIRSCH, “Exact Bose expansion for general spin”, *Journal of Physics A : Mathematical and General* **13**, 453 (1980).
- [45] I GOLDHIRSCH, “Phase operator and phase fluctuations of spins”, *Journal of Physics A : Mathematical and General* **13**, 3479 (1980).
- [46] I GOLDHIRSCH et V YAKHOT, “Magnon renormalization in the Heisenberg ferromagnet”, *Physical Review B* **21**, 2833 (1980).
- [47] I GOLDHIRSCH, E LEVICH et V YAKHOT, “Exact boson representation of quantum spin systems and investigation of their critical behavior”, *Physical Review B* **19**, 4780 (1979).
- [48] J.-W. HWANG, “Thermal expansion of nickel and iron, and the influence of nitrogen on the lattice parameter of iron at the Curie temperature”, (1972).
- [49] J BANDYOPADHYAY et K. GUPTA, “Low temperature lattice parameter of nickel and some nickel-cobalt alloys and Grüneisen parameter of nickel”, *Cryogenics* **17**, 345-347 (1977).
- [50] M BELHADI, R CHADLI, A KHATER et M ABOU GHANTOUS, “Spin dynamics across an inhomogeneous atomic boundary separating ultrathin Heisenberg ferromagnetic films”, *The European Physical Journal Applied Physics* **37**, 25-31 (2007).
- [51] F GAGEL et K MASCHKE, “Influence of potential barriers, disorder and dissipation on the quantum Hall effect”, *physica status solidi (b)* **205**, 363-372 (1998).
- [52] D. G. LUENBERGER, Y. YE et al., *Linear and nonlinear programming*, t. 2 (Springer, 1984).
- [53] M. PAJDA, J KUDRNOVSKÝ, I. TUREK, V. DRCHAL et P. BRUNO, “Ab initio calculations of exchange interactions, spin-wave stiffness constants, and Curie temperatures of Fe, Co, and Ni”, *Physical Review B* **64**, 174402 (2001).
- [54] D. GHADER, V. ASHOKAN, M. A. GHANTOUS et A. KHATER, “Spin waves transport across a ferrimagnetically ordered nanojunction of cobalt-gadolinium alloy between cobalt leads”, *The European Physical Journal B* **86**, 1-8 (2013).
- [55] M FRESNEAU, A VIRLOUVET et A KHATER, “Calculation of the phase diagrams of ferromagnetic alloys AcB1- c and application to transition metal–rare-earth FecGd1- c and FecTb1- c materials”, *Journal of magnetism and magnetic materials* **202**, 220-230 (1999).

Conclusion générale

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude théorique de la dynamique des ondes de spin dans des structures sandwichs de type Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni, mettant en jeu des interfaces entre métaux de transition (Fe ou Ni) et une terre rare (Gd). Ces systèmes sont constitués de n plans atomiques de Gd insérés entre deux sous-systèmes semi-infinis de fer ou de nickel. Quatre cas ont été considérés, correspondant à $n = 5, 6, 7$ et 8 .

L'intérêt croissant pour ces structures réside dans leur potentiel d'application dans le domaine émergent de l'électronique de spin, où la maîtrise fine des excitations magnétiques constitue un enjeu majeur. Leur étude théorique, notamment en ce qui concerne les interfaces antiferromagnétiques, reste un défi, en raison des ruptures de symétrie et des contrastes d'échange magnétique qu'elles introduisent. Dans cette optique, nous avons développé une approche théorique basée sur le modèle d'Heisenberg et la méthode de raccordement, afin de décrire la propagation et la localisation des ondes de spin dans ces systèmes sandwichs. Cette méthode a permis d'examiner l'impact du nombre de plans de gadolinium sur les états magnoniques localisés induits par les interfaces antiferromagnétiques et les propriétés propres du Gd.

Les résultats obtenus montrent clairement que le nombre et la nature des états localisés dépendent fortement du nombre de plans atomiques de Gd insérés dans le métal de transition utilisé. Plus précisément, pour les faibles valeurs de n , les états localisés observés dans les courbes de dispersion sont principalement des états d'interface de type Tamm ou Shockley, confinés aux discontinuités de couplage magnétique. À mesure que l'épaisseur de la couche de Gd augmente, on observe l'apparition de modes confinés internes, associés à des états fortement localisés dans la couche de Gd, dont la signature est visible sous forme de courbes quasi verticales dans le diagramme de dispersion.

Les structures à base de Fe montrent un plus grand nombre d'états localisés que celles à base de Ni, en raison du plus fort contraste d'échange magnétique entre Fe et Gd. Le nickel, avec un paramètre d'échange plus faible, génère moins de confinement, mais permet tout de même l'apparition d'états hybrides.

L'ensemble des résultats met en évidence l'existence de plusieurs types d'états localisés, à savoir : des états d'interface (faible dispersion, à basse ou moyenne fréquence), des états confinés (fréquence élevée, vecteur d'onde constant) et des états hybrides ou quasi-localisés, sensibles aux interférences magnétiques et aux conditions aux limites. Ainsi, chaque valeur de n imprime une signature spectrale spécifique dans la structure des bandes magnoniques, soulignant l'importance du contrôle de l'épaisseur du Gd pour moduler les propriétés dynamiques des sandwichs. Ce travail met en lumière la richesse des phénomènes de localisation dans ces systèmes et leur dépendance aux paramètres structuraux et magnétiques.

Malgré les avancées obtenues, de nombreuses questions restent ouvertes, en particulier sur l'effet combiné d'autres interactions (anisotropie, champ externe, température), et sur la généralisation à d'autres systèmes multicouches. L'approche utilisée, fondée sur des simulations

numériques et la méthode de raccordement, constitue un outil robuste pour explorer ces phénomènes, mais devra être enrichie dans de futurs travaux. Ce chapitre ouvre donc la voie à plusieurs perspectives, notamment l'application de notre méthode pour déterminer les conductances et les densités d'états magnoniques dans ce type de systèmes, l'extension de cette approche à des multicouches incluant d'autres terres rares ou des alliages métalliques et une modélisation des courants de spin induits par des gradients de température pourrait relier ces états localisés à des phénomènes thermoélectriques, pertinents pour la récupération d'énergie.

Résumé

L'utilisation d'ondes de spin dans la transmission et le stockage d'information constitue une alternative prometteuse aux dispositifs électroniques conventionnels. Ce travail de mémoire présente une étude théorique de structures sandwiches de types Fe/nGd/Fe et Ni/nGd/Ni, où un film de gadolinium (Gd) composé de n plans atomiques est inséré entre deux systèmes semi-infinis de fer (Fe) ou de nickel (Ni). Ces structures permettent d'explorer les effets d'interface, le confinement des magnons, ainsi que les conditions d'émergence d'états localisés. La propagation des ondes de spin est étudiée à l'aide de l'Hamiltonien de Heisenberg, associé à la méthode de raccordement pour déterminer les spectres de dispersion et identifier les états associés aux couches de Gd. Les résultats montrent que le nombre de plans atomiques de Gd influence de manière significative le nombre et la nature des états localisés. Ces travaux contribuent à une meilleure compréhension du transport magnonique dans les systèmes dispersifs, ouvrant ainsi des perspectives pour le développement de dispositifs spintroniques à faible consommation d'énergie.

Mots-clés : Etats localisés magnoniques, méthode de raccordement, Interfaces magnétiques, Hamiltonien d'Heisenberg

Abstract

The use of spin waves for information transmission and storage represents a promising alternative to conventional electronic devices. This work presents a theoretical study of sandwich structures of Fe/nGd/Fe and Ni/nGd/Ni types, where a gadolinium (Gd) film composed of n atomic layers is inserted between two semi-infinite systems of iron or nickel. These structures make it possible to explore interface effects, magnon confinement and the conditions for the emergence of localized states.

The propagation of spin waves is studied using the Heisenberg Hamiltonian, combined with the matching method to determine dispersion spectra and identify states associated with the Gd layers. The results show that the number of Gd atomic layers significantly affects the number and nature of the localized states. These findings contribute to a better understanding of magnonic transport in scattering systems, paving the way for the development of energy-efficient spintronic devices.

Keywords : Localized magnonic states, Matching method, magnetic interfaces, Heisenberg Hamiltonian.

