



HAL
open science

Contribution aux théories quantiques du transfert de spin, du transport à l'échelle mésoscopique et de la fusion à deux dimensions

Xavier Waintal

► **To cite this version:**

Xavier Waintal. Contribution aux théories quantiques du transfert de spin, du transport à l'échelle mésoscopique et de la fusion à deux dimensions. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2008. tel-00282206

HAL Id: tel-00282206

<https://theses.hal.science/tel-00282206>

Submitted on 26 May 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire d'Habilitation à Diriger les
Recherches

Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)
Spécialité : Physique théorique

Xavier WAIN TAL

Contribution aux théories quantiques
du transfert de spin,
du transport à l'échelle mésoscopique
et de la fusion à deux dimensions.

Table des matières

1	Curriculum vitae.	4
1.1	Formation, Expérience professionnelle	4
1.2	Expérience dans l'enseignement	5
1.3	Séminaires, Conférences, Financements, Encadrement.	5
1.4	Divers	7
2	Encadrement et collaborations.	8
3	Résumé du travail de recherche.	9
4	Summary of the research activity	11
5	Projet de recherche.	12
6	Mémoire.	14
6.1	Introduction.	14
6.2	Fluctuations mésoscopiques et matrices aléatoires.	16
6.2.1	Fluctuations mésoscopiques du facteur gyromagnétique.	16
6.2.2	Fluctuations mésoscopiques des résonances Fano.	18
6.2.3	Vers un outil de simulation générale des systèmes mé- soscopiques.	20
6.3	Électronique de spin.	25
6.3.1	Théorie quantique du transfert de spin.	25
6.3.2	Systèmes hybrides ferromagnétiques-supraconducteurs.	28
6.3.3	Un système modèle : les petits grains magnétiques.	30
6.4	Gaz quantiques corrélés à deux dimensions.	32
6.4.1	Fusion du cristal de Wigner.	35
6.4.2	Une incursion dans la physique atomique : gaz de bo- sons en interaction dipolaire.	37
6.4.3	Localisation d'Anderson et problème à N corps.	38
6.5	Conclusion et perspectives.	43
6.5.1	Du transport polarisé à la dynamique magnétique	43
6.5.2	Transport quantique hyperfréquence et électronique de spin	44
6.5.3	Quelques autres développements autour de notre code de transport quantique	45
6.5.4	Le gaz électronique bidimensionnel désordonné	45

6.5.5	Algorithmes Monte-Carlo quantiques et problème de signe	46
	Liste de publications	48

1 Curriculum vitae.

Xavier WAIN TAL

Service de Physique de l'état condensé, CEA Orme des merisiers
91191 GIF-SUR-YVETTE CEDEX
Tel : 01 69 08 94 88, Fax : 01 69 08 87 86,
email : xavier.waintal@cea.fr

1.1 Formation, Expérience professionnelle

- **2002-** Chercheur en physique théorique mésoscopique au Service de Physique de l'Etat Condensé, CEA Saclay. Travaux sur l'électronique de spin, le magnétisme des systèmes mésoscopiques et l'utilisation des techniques de Monte-Carlo quantique dans la fusion du cristal de Wigner. **2007** : Encadrement d'une thésarde (G. Fleury, mesure de la localisation d'Anderson dans un système en interaction par une technique d'intégrale de chemin stochastique à température nulle) et d'un postdoc (K. Kazymyrenko, calcul des fonctions de Green d'un système quantique ouvert. Application à l'étude de la dynamique couplée du transport et des degrés de liberté magnétique dans des dispositifs d'électronique de spin). **Dec. 2004** : Soutenance de la thèse de H. Falakshahi, coencadré avec J-L Pichard.
- **1999-2001** Research Associate (postdoc) à l'université de Cornell, New York, dans le groupe du Prof. P.W. Brouwer. Travaux portant sur la physique mésoscopique : spectroscopie de petits grains métalliques et effets mésoscopiques dans des matériaux magnétiques.
- **1996-1999** Doctorat de physique théorique de l'Ecole Polytechnique, (mention tres honorable avec felicitations du jury) sous la direction de Jean-Louis Pichard. Travail portant sur l'“Effet de l'interaction Coulombienne sur la localisation d'Anderson dans des systèmes de basses dimensions”.
- **1995-96** D.E.A de physique théorique de l'Ecole Normale Supérieure de Paris (mention bien).
Janvier-Fevrier 1996 : Stage de physique expérimentale au Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC) du C.E.A (Saclay) avec Marc Sanquer (mesure de magnétoconductance dans des jonctions semi-

- conducteur supraconducteur à très basse température).
- **1993-95** Elève à l'Ecole Polytechnique
Avril-Juillet 1995 : Stage de physique théorique au SPEC avec Jean-Louis Pichard, récompensé par le prix d'option de l'Ecole Polytechnique (étude de la multifractalité du recouvrement des fonctions propres du Hamiltonien d'Anderson)
- **1992-93** Aspirant au sein de l'Armée de l'Air.
- **1990-92** Classe préparatoire Math. Sup et Math. Spé (P') effectuées au Lycée du Parc (Lyon)
- **1990** Baccalauréat Série C (mention très bien)

1.2 Expérience dans l'enseignement

- **2007-** Travaux dirigés de physique statistique à l'Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielle de Paris (ESPCI) (cours de JP Bouchaud).
- **2006-** Cours d'introduction à la supraconductivité mésoscopique au Master2 MATEC de l'université de Versailles.
- **2003** Cours d'introduction à la l'électronique de spin à l'école Franco-Roumaine de Brasov.
- **2002** Cours d'introduction à la physique mésoscopique, Ecole Doctorale de la région parisienne (Service de Physique Théorique, CEA Saclay).
- **2000** Cours de supraconductivité à l'Ecole doctorale de l'université de Cornell
- **1996-1999** Chargé de travaux dirigés en mathématiques à l'Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielle de Paris (ESPCI) (cours de N. Boccara).
- **1996** "Colleur" en mathématiques au Lycée Florent Schmitt (préparation aux concours des écoles de commerce).

1.3 Séminaires, Conférences, Financements, Encadrement.

- **2007** Communication invitée à la conférence "Magnetolectronics"(Oslo). Deuxième conférence Dynamax (Groningen). Encadrement de la thèse de G. Fleury. Troisième conférence Dynamax (Louvain). Séjour invité dans le groupe d'Arne Brataas (Trondheim).
- **2006** Obtention d'un réseau européen ("Dynamax") STREP sur l'électronique de spin. Communication à la première réunion plénière de Dy-

- namax (Delft). Séminaire au LPTMS (Orsay). Encadrement du stage M2 de G. Fleury. Séjour invité au Center of Advance Studies (Oslo). Encadrement du postdoc de K. Kazymyrenko.
- **2005** Obtention d’une bourse de postdoc de la région Ile-de-France.
 - **2004** Communication invitée au GDR mésoscopie (Aussois). Communication invitée à la conférence du réseau européen de nanoelectronique (Hambourg). Obtention de l’ACI “Paroi” sur l’injection de spin dans les parois magnétiques. Séminaire au LPS (Orsay). Séminaire au laboratoire Thalès.
 - **2003** Coencadrement de la thèse de H. Falakshahi. Séjour invité au Weizmann institute (Israël). Communication à la conférence du réseau européen de nanoelectronique (Majorque). Séminaire au CRTBT (Grenoble). Encadrement du stage de DEA de C. Petitjean. Coencadrement du postdoc de J. Carrey. Enseignement à l’école Franco-Roumaine de magnétisme (Braslov). Conférence de physique mésoscopique (Lancaster).
 - **2002** Séjour invité au workshop de Chaos Quantique (Seattle). Communication invitée à la première conférence internationale sur le transfert de spin par injection de courant (Lausanne). Séminaire à l’IPCM (Strasbourg). Séminaire au Kavli Institute of NanoScience (Delft). Séminaire au SPhT (Saclay).
 - **2001** Communication au March meeting (Seattle). Poster aux XXXV^e rencontres de Moriond. Séminaire à l’université de Genève.
 - **2000** Communication au March meeting (Minneapolis). Séjour invité au workshop sur la transition métal-isolant à deux dimensions (Leiden).
 - **1999** Communication invitée au congrès “Localisation 1999” (Hambourg). Courte communication orale aux journées de la physique statistique (ESPCI). Participation à l’école d’hiver de l’université Hébraïque (Jerusalem). Séminaire au Technion (Haifa).
 - **1998** Séjour invité à l’institut-Lorentz (Leiden). Courte communication orale aux journées de la physique statistique (ESPCI). Participation à l’école d’été des Houches “topology and low dimensional physics”. Communication orale à la réunion du réseau européen RTN sur la physique mésoscopique (Ioanina).
 - **1997** Séjour et séminaire à l’université d’Augzburg. Poster aux Rencontres européennes sur la physique mésoscopique (Madrid).

1.4 Divers

- Langues : Anglais courant (séjour de 2 ans dans l'État de New York), bon niveau d'Espagnol (séjours de 8 mois en Amérique latine)
- Informatique : langages C++, Python, Fortran, Pascal, Mathematica, Matlab et librairies MPI sous environnement Linux, UNIX et Windows.
- Né le 30 juillet 1972 a Grenoble, nationalité française, marié, deux enfants.

2 Encadrement et collaborations.

J'anime actuellement une petite équipe de cinq personnes incluant K. Kazymyrenko (postdoc), G. Fleury (thèse), V. Rychkov (postdoc) et S. Borlenghi qui vient de commencer sa thèse en cotutelle avec Olivier Klein et moi-même. Mon travail se situe au sein du groupe de nanoélectronique du SPEC, groupe à la fois expérimental (F. Portier, P. Roche, I. Moukharski et C. Glattli) et théorique (J-L Pichard et moi-même).

J'ai eu l'occasion de participer à l'encadrement d'une thèse pour la première fois lors de mon stage postdoctoral à l'université de Cornell (thèse de Shaffique Adams sur le couplage spin-orbit dans des nanograins métalliques).

Depuis mon embauche au Service de Physique de l'Etat Condensé en 2001, je mène une activité de recherche autonome en collaboration avec d'autres jeunes théoriciens (Olivier Parcollet, Christophe Mora), avec des équipes expérimentales du laboratoire (Michel Viret, Hugues Pothier, Patrice Roche, Fabier Portier) ou avec mes propres étudiants et postdocs.

J'ai encadré en 2003 le stage de master M2 de Cyril Petitjean sur un modèle intégrable de supraconductivité. En 2003 également, Jullian Carrey a effectué un stage postdoctoral coencadré par moi-même et M. Viret sur la réalisation expérimentale de mesures de blocage de Coulomb dans des agrégats magnétiques. J'ai également encadré la deuxième partie de la thèse d'Houman Falakshahi sur la fusion quantique du cristal de Wigner (2003-2004). Depuis 2005, Kyryl Kazymyrenko effectue son stage postdoctoral sous ma direction dans le domaine de l'électronique de spin. Geneviève Fleury a effectué son stage M2 (2006), puis maintenant sa thèse sous ma responsabilité (localisation d'Anderson et corrélations). Valentin Rychkov vient de rejoindre l'équipe pour travailler sur l'électronique de spin dans le cadre du réseau européen Dynamax (STREP).

3 Résumé du travail de recherche.

Mon travail de recherche en physique théorique de la matière condensée s’articule autour de trois axes : le transport quantique mésoscopique, l’électronique de spin (“spintronique”) et les systèmes fortement corrélés.

1. *Physique mésoscopique.* Ma thématique initiale de recherche était le transport quantique cohérent, avec en particulier l’utilisation de la théorie de “Scattering” et de la théorie des matrices aléatoires. Les matrices aléatoires fournissent une théorie universelle des fluctuations mésoscopiques que l’on peut observer à travers le facteur gyromagnétique [21, 14, 13] d’un petit ($\sim 2nm$) grain métallique ou encore la résonance Fano d’un “billard quantique”[19] dans une hétérostructure semiconductrice.

2. *Electronique de spin.* Le transport dans les systèmes magnétiques, comme les nanopilliers Co-Cu-Co, a longtemps été décrit par des modèles essentiellement classiques ou semi-classiques. J’ai voulu mettre en place [20, 10] une approche de type Landauer-Buttiker (très féconde en physique mésoscopique) pour décrire les phénomènes de transport (Magnéto Résistance Géante, GMR) mais surtout la physique du transfert de spin où les électrons de conduction viennent modifier la dynamique magnétique. Cette approche permet de mettre en relief de fortes analogies entre les systèmes magnétiques et les systèmes mésoscopiques traditionnels, en reliant par exemple les courants permanents à l’interaction d’échange entre des couches magnétiques [15]. Une prolongation naturelle de ces travaux est l’étude de systèmes à la fois mésoscopiques et magnétiques, avec les systèmes hybrides ferromagnétiques-supraconducteurs [16, 18, 15] ou la spectroscopie de particules magnétiques très petites [11, 8, 6].

3. *Monte-Carlo quantique.* Cette dernière thématique, assez indépendante des deux précédentes, concerne l’étude d’un système extrêmement simple (le gaz d’électrons à deux dimensions) mais d’une approche théorique difficile (problème quantique à N corps en présence d’interactions à longue portée). Une des problématiques principales de ce sujet est la possibilité que les corrélations stabilisent une phase métallique, phase observée dans des transistors MOSFETs mais à ce jour inexpliquée. Notre approche a été d’utiliser des techniques de Monte-Carlo quantique similaires à celles utilisées, entre autres, dans la physique de l’hélium. Pour le système propre, nous avons montré [9, 7] que la transition vers le cristal de Wigner se fait en deux temps, avec d’abord une brisure de symétrie puis, à plus basse densité, une localisation des électrons. Nous cherchons maintenant à mesurer les propriétés de

localisation d'Anderson en présence de désordre et interactions [2].

4 Summary of the research activity

My research activity in theoretical condensed matter is focused around three axes : quantum transport at the mesoscopic scale, spintronic and strongly correlated systems.

Mesoscopic physics. My initial background was coherent quantum transport within the framework of Scattering theory and Random matrix theory. Random matrices provide a universal theory of mesoscopic fluctuations that can be observed through, for instance, the gyromagnetic factor [21, 14, 13] of a small ($\sim 2nm$) metallic grain or Fano resonances in a quantum billard in a semiconductor heterostructure [19].

Spintronic. Transport in magnetic systems (like Co-Cu-Co nanopillars) has been described for a long time within theories that are essentially classical or semi-classical. I have developped [20, 10] a Landauer-Buttiker kind of approach (standard in mesoscopic physics) to describe transport properties (like Giant Magneto Resistance GMR) as well as spin torque physics where one is interested in the effect of the conducting electrons on the magnetization dynamics. This approach highlights strong analogies between magnetic systems and traditional mesoscopic devices linking for instance persistent current to the exchange interaction between magnetic layers [15]. A natural extension of these works is the study of magnetic systems which are also mesoscopic, like hybrid ferromagnetic-superconductor systems [16, 18, 15] or the spectroscopy of ultrasmall magnetic grains [11, 8, 6] .

Quantum Monte-Carlo. This last subject, quite independant from the previous two, concerns a very simple system (the two dimension electron gaz) yet very difficult to tackle theoretically (quantum many-body problem with long range interactions). One of the most important questions is the possibility of the existence of a metallic phase (observed experimentally in Silicon MOSFETs but yet unexplained) stabilized by the interactions. Our approach is to use quantum Monte-Carlo techniques similar to those used (for instance) in Helium physics. In the clean case, we have shown [9, 7] that the transition toward the Wigner crystal at low density happens in two steps with first a symmetry breaking and secondly, at lower density, localization of the electrons. We are now looking at the interplay of Anderson localization with the electron-electron correlations [2].

5 Projet de recherche.

Mes projets actuels se concentrent autour de l'électronique de spin, des phénomènes à hautes fréquences, des nouveaux matériaux (comme le graphène ou les métaux antiferromagnétiques) et de la compétition entre désordre et interaction dans les gaz électroniques à basse dimension.

1. *Hyper-fréquences et électronique de spin.* Si la théorie *dc* de la magnéto-résistance géante (GMR) et du transfert de spin est maintenant assez bien maîtrisée, de nombreux phénomènes nouveaux sont observés à haute fréquence. Dans le cadre du formalisme hors équilibre Keldysh, nous nous efforçons de mettre en place une théorie du transport et du transfert de spin à fréquence finie. Par analogie avec la physique mésoscopique, on devrait ainsi pouvoir étudier différents effets comme le transfert de spin photoassisté ou des corrections de fréquence finie à la GMR.

2. *Vers un outil de simulation générale pour le transport quantique.* Le cadre du formalisme de Landauer-Buttiker est très précieux pour l'étude du transport quantique, mais il ne permet que très difficilement de faire un calcul microscopique pour un système particulier. Nous développons actuellement un outil numérique très versatile, basé sur une généralisation des techniques de fonctions de Green récursives. Cet outil permettra le calcul du transport quantique dans des systèmes cohérents multi-terminal, à géométrie complexe en présence de matériaux normaux, magnétiques et/ou supraconducteurs. Il sera utilisé pour tester la robustesse des approches théoriques, explorer rapidement de nouvelles idées d'effets physiques, ainsi que directement dans des groupes expérimentaux.

3. *Électronique de spin à l'échelle nanométrique.* Le champ de l'électronique de spin aux très petites échelles est encore largement inexploré. En particulier, on s'attend à des effets intéressants dans des systèmes balistiques (plus petit que le libre parcours moyen élastique). Nous nous intéresserons, entre autres, aux jonctions à cassure formées à partir d'un métal magnétique qui peuvent être vues comme un système modèle d'une jonction diffusive-balistique-diffusive.

4. *Désordre et interaction à deux dimensions.* Nous avons adapté notre technique de Monte-Carlo quantique à la mesure des propriétés de transport d'un gaz (corrélé) d'électrons en présence d'un désordre statique. Ainsi, nous avons pu montrer que pour des électrons polarisés, la théorie d'échelle de la localisation restait valable en présence de corrélations. Le système reste ainsi isolant. Expérimentalement, un comportement métallique a pourtant

été observé dans des systèmes non-polarisés, contredisant ainsi l'idée (fortement admise) qu'il ne pouvait y avoir de métaux à deux dimensions. C'est ce métal corrélé que nous cherchons maintenant à mettre en évidence.

6 Mémoire.

Le mémoire qui suit est conçu comme un guide de lecture. Pour chacun de mes thèmes de recherche, j'ai cherché à décrire le cadre dans lequel se situe le travail et à en expliquer les résultats principaux. Le lecteur est invité à se référer aux articles pour plus de détails, notamment sur le développement des outils théoriques. Cette notice couvre la période allant d'octobre 2000 (début de mon postdoc à Cornell) à septembre 2007.

6.1 Introduction.

Un des aspects les plus déroutants de la mécanique quantique est le postulat dit de la mesure, qui précise comment, lorsqu'on cherche à mesurer une quantité physique, on affecte le système et "projette" la fonction d'onde qui lui est associée. Ce postulat paraît souvent un peu paradoxal et pose surtout la question de ce qu'est une mesure en mécanique quantique. La physique mésoscopique a énormément contribué, au cours des vingt dernières années, à clarifier cette problématique. Dans une expérience typique, un objet quantiquement cohérent (par exemple une molécule de nanotube de carbone ou un petit grain métallique placé à très basse température) est relié par une série de fils de mesure de plus en plus gros aux appareils macroscopiques (sources de tension, analyseurs de spectre...) qui serviront à mesurer sa résistance électrique. On passe ainsi continûment de l'échelle macroscopique "classique" à une échelle dite mésoscopique où la dynamique est décrite par la mécanique quantique. Sur le plan théorique, le formalisme de Landauer-Buttiker¹ a permis d'avoir une compréhension à la fois intuitive et opérationnelle de ces systèmes. Le système quantique y est décrit en terme de ses propriétés de "Scattering" (ce qui est émis en fonction de ce que l'on injecte), et on introduit la notion de "réservoirs" (ou électrodes de mesure) qui forment, en quelque sorte, les conditions aux bords imposées par le monde macroscopique à l'objet cohérent. Une autre approche (totalement équivalente, plus systématique mais moins intuitive), le formalisme des fonctions de Green hors équilibre de Keldysh,² vient compléter l'arsenal théorique.

Dans la première partie de ce mémoire, j'exposerai mes travaux sur une

¹Y. M. Blanter et M. Buttiker, Phys. Rep. **336**, 1 (2000).

²P. N. C Caroli, R Combescot and D. Saint-James, J. Phys. C **4**, 916 (1971), Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992), L. Keldysh, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1515 (1964).

sous classe de ces systèmes, les systèmes à dimension zéro. Par dimension zéro, on entend le fait qu'un électron injecté dans le système reste suffisamment longtemps avant de ressortir pour avoir exploré l'ensemble de l'espace des phases (il faut s'imaginer une boule de billard qui rebondirait de nombreuses fois avant de ressortir) de sorte que la dimension réelle (1,2 ou 3) de l'objet ne joue plus de rôle dans sa dynamique. Un des aspects remarquables de ces objets est que leur dynamique est complètement universelle. Plus précisément, les fluctuations quantiques que l'on observe dans différentes quantités physiques ne dépendent pas du système étudié, et les mêmes résultats sont obtenus avec des systèmes physiques très différents (comme un gaz bidimensionnel dans une hétérostructure semiconductrice et un petit grain métallique de cuivre ou d'argent). Nous avons développé la théorie des fluctuations mésoscopiques des résonances de Fano et du facteur gyromagnétique. Cela nous a amené à étudier des ensembles de matrices aléatoires ³ qui interpolent entre la symétrie orthogonale (GOE) et la symétrie sympléctique (GSE). Cette partie se termine sur la description d'un outil de simulations numériques actuellement en développement. Cet outil devrait faciliter énormément l'application des concepts généraux à des systèmes concrets.

La seconde partie de ce mémoire est consacrée à l'électronique de spin à laquelle nous avons adapté le cadre théorique de Landauer-Buttiker. C'est un domaine en pleine expansion, où de nombreuses problématiques liées à la charge et au courant se transposent en des effets similaires en termes de spin et de courants de spin. Le champ de recherche est né avec la découverte de la résistance géante (GMR) ⁴ où l'on s'intéresse à l'influence de la configuration des degrés de liberté magnétiques sur les propriétés de transport électronique. Le potentiel applicatif de la GMR a été reconnu très vite et elle est aujourd'hui à la base des dispositifs de tête de lecture des disques durs. Ce n'est que récemment que l'effet "miroir" où un courant électrique influence la configuration magnétique a été prédit ⁵ puis observé ⁶. Cet effet, le transfert de spin, permet d'imaginer des dispositifs d'électronique de spin contrôlés entièrement de façon électrique, et les applications potentielles

³M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic, New York, 1991), C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).

⁴M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich et J. Chazelas *Phys. Rev. Lett.* **61**, 002472 (1988)

⁵J. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* **159**, L1 (1996).

⁶E. B. Myers, D. C. Ralph, J. A. Katine, R. N. Louie et R. A. Buhrman, *Science* **285**, 867 (1999).

sont nombreuses (mémoires magnétiques MRAM, sources micro-ondes accordables...). Nous aborderons d'abord la théorie quantique du transfert de spin. Puis, nous discuterons de systèmes situés à l'interface entre l'électronique de spin et la physique mésoscopique, pour lesquels on peut prédire des effets surprenants (systèmes hybrides supraconducteurs-ferromagnétiques, effet tunnel au travers de petites particules magnétiques).

La dernière partie de ce mémoire est relativement indépendante des deux précédentes. Elle concerne la détermination du diagramme de phase d'un système extrêmement simple, le gaz d'électrons bidimensionnel à température nulle. Il s'agit d'un problème très différent de ceux qui précèdent au sens où il est très bien posé mais son approche théorique est particulièrement délicate (problème quantique à N corps). En l'absence de corrélations, la théorie d'échelle de la localisation ⁷ prévoit qu'un désordre infinitésimal suffit à rendre la gaz isolant. Ce paradigme (pas de métal à deux dimensions) était communément admis jusqu'à l'observation ⁸ en 1994 d'une phase métallique à basse densité dans des MOSFETs au silicium extrêmement propres. À basse densité, les corrélations électrons-électrons deviennent importantes et les approches analytiques usuelles s'effondrent. Nous détaillerons notre approche utilisant une technique de Monte-Carlo quantique et les résultats que nous avons obtenus, à la fois dans le problème sans désordre (fusion quantique du cristal de Wigner) et sur l'étude du problème désordonné (loi d'échelle à N corps).

6.2 Fluctuations mésoscopiques et matrices aléatoires.

Dans ce qui suit, je présente l'ensemble de mes travaux sur la physique mésoscopique à l'exception de [17] sur le blocage de Coulomb hors équilibre.

6.2.1 Fluctuations mésoscopiques du facteur gyromagnétique.

Un petit grain métallique (cuivre, argent, aluminium) de quelques nanomètres, plongé à une température de quelques millikelvins, peut être considéré comme un atome artificiel au spectre énergétique bien défini. A la différence des vrais atomes cependant, ces grains n'ont aucune symétrie spatiale et

⁷E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan , Phys. Rev. Lett **42**, 673 (1979).

⁸S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov and M. D'Iorio , Phys. Rev. B **50**, 8038 (1994).

leurs dynamiques classiques sont complètement chaotiques. Lorsqu'on s'intéresse à des temps longs (petites énergies), tout l'espace des phases du système est exploré à l'échelle considérée et on entre dans le régime universel de "dimension zéro". D'un point de vue statistique, la distribution des positions des niveaux d'énergie ϵ_i est très bien décrite par la théorie des matrices aléatoires, i.e. ces niveaux fluctuent comme s'ils étaient les valeurs propres d'un Hamiltonien sans structure dont tous les éléments de matrice seraient des variables aléatoires indépendantes. Expérimentalement⁹, on effectue la spectroscopie de ces grains grâce au phénomène du blocage de Coulomb : le grain est connecté à des électrodes par des barrières tunnels (oxydes) et on mesure la caractéristique courant-tension $I(V)$ du dispositif. Lorsque l'énergie eV d'injection d'un électron atteint un niveau ϵ_i , l'électron peut tunneler à travers ce niveau et un pic apparaît sur la courbe dI/dV . Un exemple d'une telle mesure de dI/dV est présenté dans la Fig.1 en fonction de l'énergie d'injection (E sur la figure) et d'un champ magnétique B appliqué. On observe que les niveaux se séparent sous champ, signature de l'effet Zeemann qui donne aux électrons up et down une énergie $\epsilon_i \rightarrow \epsilon_i \pm \mu_B g B$ où μ_B est le magnéton de Bohr et g le facteur gyromagnétique des électrons. Ces données expérimentales permettent donc d'accéder aux fluctuations mésoscopiques du facteur gyromagnétique. Pour des systèmes légers (comme l'aluminium) où l'interaction spin-orbite est faible, le facteur gyromagnétique est celui des électrons libres, $g = 2$ sans fluctuation. L'interaction spin-orbite a pour effet de diminuer les g (le spin est moins bien défini) et surtout de les faire fluctuer de niveau à niveau : les fluctuations universelles des fonctions propres associées aux ϵ_i entraînent, via le spin-orbite, des fluctuations universelles des g . Nous avons développé la théorie de ces fluctuations [21]. Les facteurs gyromagnétiques sont en fait des tenseurs gyromagnétiques dont les axes principaux x, y, z sont distribués de manière isotrope dans l'espace. La séparation δE des pics sous champ est alors donnée par

$$(\delta E)^2 = \frac{1}{4} \mu_B^2 \left[(g_x B_x)^2 + (g_y B_y)^2 + (g_z B_z)^2 \right] \quad (1)$$

où les trois valeurs propres g_x, g_y et g_z sont distribuées selon l'ensemble de Laguerre,

$$P(g_x, g_y, g_z) \propto \prod_{i < j} |g_i - g_j| \prod_i e^{-3g_i^2/2\langle g^2 \rangle} \quad (2)$$

⁹D. C. Ralph, C. T. Black et M. Tinkham, Phys. Rev. Lett. **74**, 3241 (1995) ; ibid **78**, 4087 (1997).

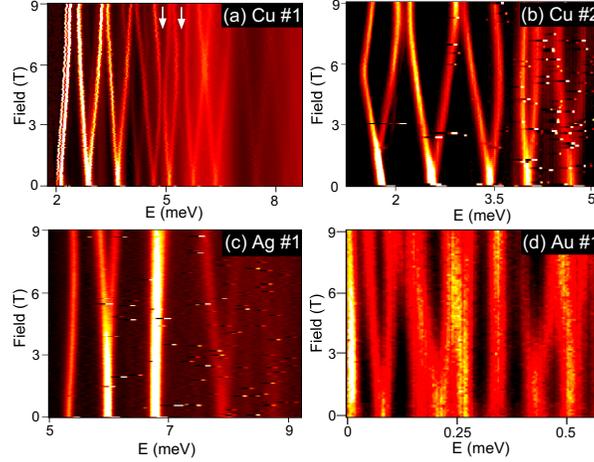


FIG. 1 – Caractéristique courant-tension dI/dV pour différents grains métalliques en fonction d’un champ magnétique B et de l’énergie d’injection E . Courbe extraite de *Studies of Spin-Orbit Scattering in Noble-Metal Nanoparticles Using Energy-Level Tunneling Spectroscopy*, J. R. Petta and D. C. Ralph, Phys. Rev. Lett. **87**, 266801 (2001)

Depuis, cette théorie a reçu une confirmation expérimentale partielle¹⁰, comme le montre la Fig. 2. D’un point de vue technique, notre théorie est basée sur un ensemble de matrices aléatoires interpolant entre la symétrie orthogonale (GOE) et la symétrie sympléctique (GSE). Un tel ensemble est très difficile à étudier analytiquement. Nous avons pu obtenir des résultats exacts grâce à une conjecture reliant cet ensemble à symétrie partiellement brisée au modèle GSE pur pour des matrices de tailles finies. Nous avons prouvé une conjecture similaire dans le cas de l’ensemble interpolant entre GOE et GUE [13], mais nous n’avons qu’une preuve numérique pour l’ensemble GOE-GSE [14].

6.2.2 Fluctuations mésoscopiques des résonances Fano.

Nous présentons ici un autre exemple [19] de système dans lequel on peut observer des fluctuations mésoscopiques. Il s’agit de petits billards quantiques (ou “points” quantiques) formés par lithographie électronique dans des gaz bi-

¹⁰J. R. Petta and D. C. Ralph Phys. Rev. Lett. **87**, 266801 (2001) et Phys. Rev. Lett. **89**, 156802 (2002)

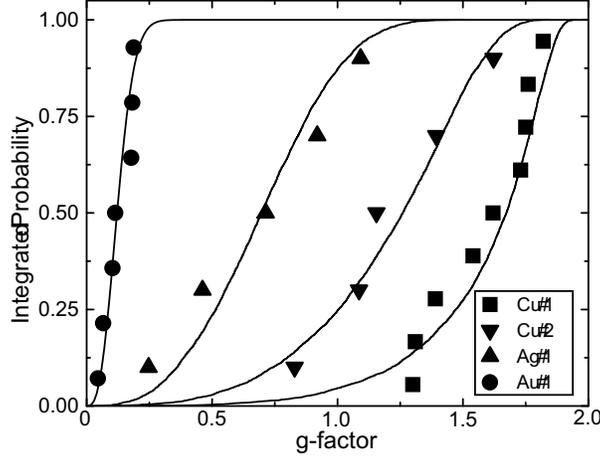


FIG. 2 – Probabilité intégrée pour la distribution des facteurs g selon une direction fixe pour les quatre échantillons de Fig. 1 (points), ainsi que la prédiction théorique des matrices aléatoires (lignes).

dimensionnels GaAs/GaAlAs de haute mobilité¹¹. Ces billards sont construits de façon à ce que les électrons puissent emprunter soit un chemin direct, soit un chemin résonnant pour traverser le système (voir Fig.3). Si ces deux chemins ont une amplitude respective $t_d = e^{i\beta_d} \sqrt{G_d}$ et $t_r(\varepsilon) = z_r \Gamma / (2\varepsilon + i\Gamma)$, (la première ne dépend pas de l'énergie ε alors que la seconde en dépend de façon Lorentzienne), alors la conductance du système $G(\varepsilon) = |t_d + t_r|^2$ présente une résonance de forme très asymétrique appelée résonance Fano,

$$G(\varepsilon) = G_d \frac{|2\varepsilon + q\Gamma|^2}{4\varepsilon^2 + \Gamma^2}, \quad (3)$$

où le paramètre (complexe) q est ici donné par : $q = i + z_r e^{-i\beta_d} / \sqrt{G_d}$. Un exemple de résonance Fano obtenu par simulations numérique est montré dans la Fig. 4. Ici aussi, on peut caractériser complètement les fluctuations du paramètre q en l'absence de champ magnétique (ensemble GOE) et en présence de champ (ensemble GUE). La forme asymétrique de la résonance est liée à l'interférence entre les deux trajectoires et donc intimement liée à la cohérence quantique dans le système. Contrairement au blocage de Coulomb, où une forme en cloche est toujours observée même en cas de tunneling

¹¹J. Göres et al. Phys. Rev. Lett. **62**, 2188 (2000)

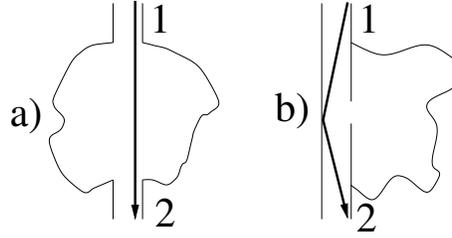


FIG. 3 – Schéma de deux billards quantiques dans lesquels on s’attend à observer des résonances Fano. La flèche indique la trajectoire directe.

non-résonnant (séquentiel), on s’attend donc ici à une forte dépendance de la forme de la résonance avec le temps de cohérence de phase τ_ϕ . Nous avons ainsi pu montrer que la mesure d’une seule résonance permettait d’extraire ce temps de cohérence de phase,

$$\frac{\hbar}{\tau_\phi} = \Gamma \left(|q|^2 + 1 - \sqrt{(|q|^2 + 1)^2 - 4(\text{Im } q)^2} \right). \quad (4)$$

Ce temps caractéristique est une quantité centrale de la physique mésoscopique et les résonances Fano pourraient constituer une alternative plus directe aux mesures de localisation faible (magnétorésistance).

6.2.3 Vers un outil de simulation générale des systèmes mésoscopiques.

Les travaux précédents traitent d’aspects universels de la physique mésoscopique. Pour ces aspects, la théorie des matrices aléatoires et le formalisme de Landauer-Buttiker sont bien adaptés. La première, de par sa structure : choisir une théorie de matrice aléatoire revient à supposer que l’on ne sait rien ou presque sur le système. La deuxième, car elle traite les systèmes quantiques comme des “boîtes noires”, entièrement décrites par leurs propriétés de Scattering (ce qui sort en fonction de ce qui entre) et s’intéresse donc peu à ce qui se passe à l’intérieur de l’échantillon. Dans bien des cas, on est intéressé par une description microscopique du système. C’est le cas lorsque sa physique dépend crucialement de sa géométrie ou des matériaux qui le constitue ou encore lorsqu’on s’intéresse à des propriétés définies localement, comme les densités de courant ou densités d’états locales.

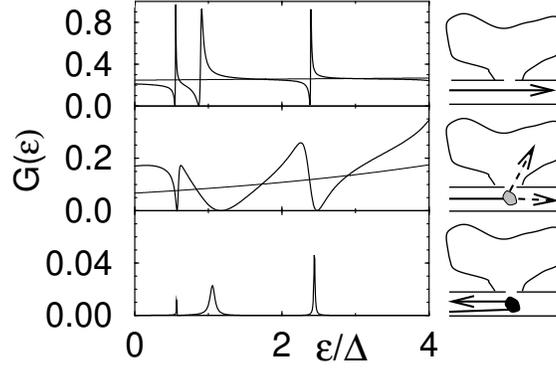


FIG. 4 – Simulation numérique de la conductance en fonction de l’énergie (tension drain-source) montrant des résonances Fano. Les trois courbes correspondent à trois forces de l’impureté placée près de l’entrée du billard.

Nous avons ainsi voulu nous doter d’un outil de simulation numérique permettant d’étudier facilement des systèmes multi-terminal, à géométrie complexe et en présence d’ordre magnétique et/ou supraconducteur pour des modèles de liaison forte. Notre approche est basée sur une généralisation d’un algorithme ancien connu sous le nom de “Recursive Green function algorithm”. Cet algorithme a été utilisé pendant plus de deux décennies pour calculer les propriétés de transport de fils quantiques quasi-unidimensionnels. Proprement généralisé, il permet d’étudier des systèmes arbitraires contenant jusqu’à quelques millions de sites. L’approche est très versatile et devrait permettre de passer d’un système à un autre avec extrêmement peu de développement supplémentaire. L’élaboration de l’algorithme et du code a été financée par le projet européen Dynamax et devrait servir en électronique de spin, à la fois pour valider certaines approches théoriques, pour explorer rapidement de nouvelles possibilités d’effets physiques ou encore pour simuler précisément les propriétés de systèmes expérimentaux. L’algorithme (et le code) n’est cependant pas restreint à l’électronique de spin (voir les exemples ci-dessous) et nous espérons qu’il ne restera pas confiné à cette problématique et deviendra un outil précieux pour le reste de la communauté.

À titre d’exemple, nous présentons dans la Fig. 5 un des premiers calculs

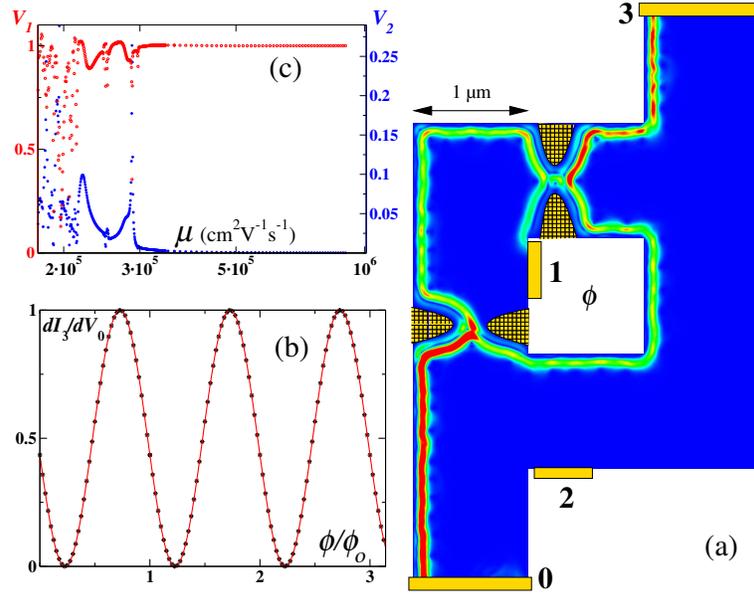


FIG. 5 – Interféromètre Mach-Zender dans un gaz 2D sous fort champ magnétique (régime d’effet Hall entier à $\nu = 1$). Calcul pour un échantillon de densité $n_s = 10^{10}\text{cm}^{-2}$, de mobilité $\mu = 10^6\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ pour une dimension typique de $1\mu\text{m}$. À droite : carte locale des courants injectés depuis le contact 0. On observe le canal de bord qui est séparé par le premier point contact puis recombinaé dans le second ($1.2 \cdot 10^6$ sites pour ce calcul). En bas à gauche, oscillations de la conductance différentielle entre les contacts 0 et 3 en fonction du flux Aharonov-Bohm dans l’îlot central. En haut à gauche, visibilité V_1 et V_2 en fonction de la mobilité de l’échantillon.

effectué pour simuler un interféromètre Mach-Zender dans une hétérostructure bidimensionnelle. L'échantillon possède une topologie non triviale (un trou au centre), quatre terminaux de mesures et deux points contacts quantiques servant de "lame semi-réfléchissantes". Il est placé sous fort champ magnétique en régime d'effet hall quantique entier à $\nu = 1$ canal de bord. La figure de droite montre le courant local injecté dans le système lorsqu'on applique une tension sur le contact d'injection 0 (les autres étant mis à la masse). On observe le canal de bord qui est séparé par le premier point contact quantique (semi-réfléchissant) puis recombinaison dans le second. Lorsqu'on rajoute un flux magnétique à travers l'îlot central, les deux chemins interfèrent et la conductance différentielle entre les contacts 0 et 3 oscille (figure en bas à gauche, flux en unité du quantum de flux h/e). On mesure dans le contact 3 un courant $I_3 \propto 1 + V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi$. Les "visibilités" V_1 et V_2 sont tracées en fonction de la mobilité de l'échantillon dans la figure en haut à droite. On constate sur cette figure que la visibilité est parfaite (≈ 1) jusqu'à une mobilité de l'ordre de $3 \cdot 10^5 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, puis décroît rapidement pour un désordre plus important. Cette décroissance correspond à la possibilité pour les électrons de traverser l'échantillon pour atteindre l'état de bord contrapropageant qui leur fait face ("backscattering") et est concomitante avec l'apparition de la composante de Fourier V_2 correspondant à des trajectoires faisant un tour complet de l'îlot. Ceci est très différent de ce qui est observé expérimentalement et nous permet de conclure que le "backscattering" n'est pas le facteur limitant de la visibilité dans les expériences.

Un deuxième exemple est l'effet hall quantique anormal dans le graphène, présenté dans la Fig. 6. On utilise le modèle des liaisons fortes pour le réseau en nid d'abeille du graphène, et on a calculé la conductance transverse et la résistance longitudinale (en bas à gauche) pour une croix de Hall avec 6 terminaux (figure de droite). On retrouve bien l'effet Hall quantique anormal $\sigma_{xy} = (N + 1/2)4e^2/h$, $N = \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots$ où apparaît un "demi" canal "gratuit" ($N = 0$) correspondant au niveau de Landau situé au point de Dirac. De façon surprenante (courbe en haut à gauche), l'étude de la densité de courant locale à $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ montre respectivement 1, 1, 2, 3, ... pics (correspondant à autant de "canaux de bords"), de sorte que le canal à $N = 0$ se "dilue" dans les autres canaux à plus haute densité.

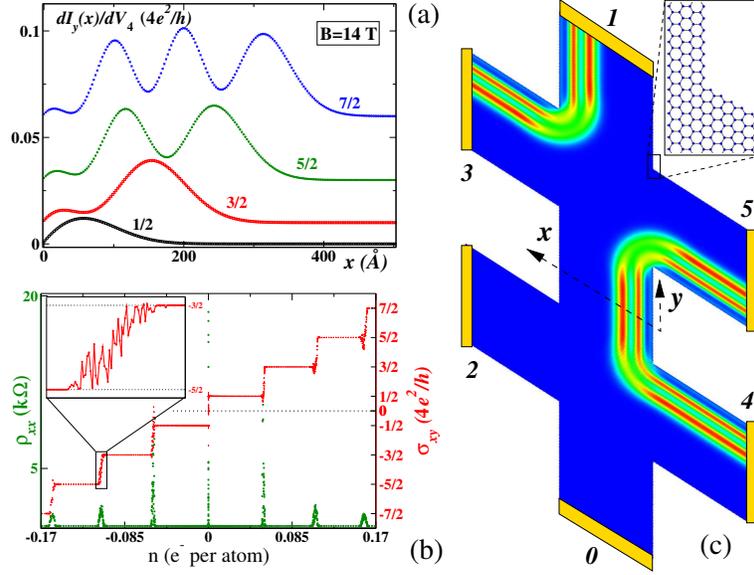


FIG. 6 – Effet hall quantique anormal dans le graphène dans l’approximation des liaisons fortes pour des conditions aux bords zigzag. (c) : densité locale de courant dans l’échantillon lorsque tous les contacts sont à la masse sauf les contacts 1 et 4 sur lesquels on applique une petite tension. Calculs à $N = 2$ et $3 \cdot 10^5$ hexagones. (b) : Conductance Hall σ_{xy} et résistance longitudinale ρ_{xx} en fonction de la densité (en électrons par atome de carbone) pour un champ magnétique $\phi = 0.014h/e$ par hexagone. Un petit potentiel désordonné de 3% de la largeur de bande a été ajouté au système. L’insert montre les fluctuations mesoscopiques à la transition entre deux plateaux. (a) : coupe de la figure (c) : densité de courant locale (par unité de tension appliquée au contact 4) à $N = 0, 1, 2, 3$ (de bas en haut, translattées pour plus de clarté) selon la direction y et en fonction de la distance x au bord de l’échantillon. L’intégrale sous les courbes vaut respectivement $1/2, 3/2, 5/2$ et $7/2$ en unité de $4e^2/h$. Calculs effectués sous un champ $B = 14\text{T}$.

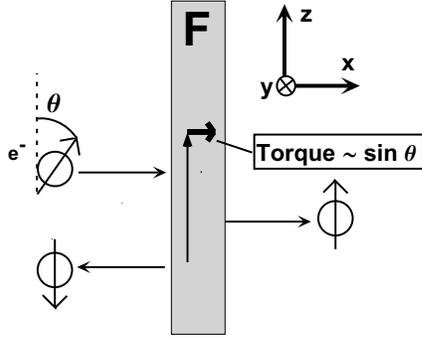


FIG. 7 – Schéma du processus élémentaire de transfert de spin. Un électron polarisé incident voit son spin perpendiculaire à la couche magnétique absorbé par celle-ci durant la réflexion/transmission

6.3 Électronique de spin.

6.3.1 Théorie quantique du transfert de spin.

Mon premier travail en électronique de spin a été la transposition du formalisme de Landauer-Buttiker au calcul du transfert de spin dans des multicouches magnétiques [20]. Un des avantages de ce formalisme est qu'il permet de se former des images intuitives de nombreux phénomènes. On décrit les deux couches magnétiques F_a et F_b d'un pilier ferro-métal normal-ferro par leurs deux matrices de scattering S_a et S_b . On calcule les amplitudes globales de transmission/réflexion comme on le ferait en optique ondulatoire : un électron incident subit une série de transmissions/réflexions (qui interfèrent entre elles) pour finalement être réfléchi ou transmis avec une certaine amplitude. Dans un modèle un peu extrême, les électrons dont le spin est parallèle à l'aimantation de la couche (majoritaires) sont parfaitement transmis tandis que ceux anti-alignés (minoritaires) sont réfléchis. Dans ce langage, il est alors naturel que la configuration dite anti-parallèle (les deux aimantations des deux couches sont anti-alignés) possède une grande résistance électrique : quel que soit son spin, un électron sera réfléchi par l'une ou l'autre des couches magnétiques. Un champ magnétique (qui aligne les deux aimantations) entraînera donc une forte diminution de la résistance : c'est l'effet de magnéto-résistance géante (GMR). L'effet de transfert de spin est

en quelque sorte la contraposée de la GMR : on ne s'intéresse pas à l'effet de la configuration magnétique sur le courant mais à l'influence d'un courant sur la dynamique magnétique. L'effet est schématisé dans la Fig. 7 : un électron polarisé (par la première couche magnétique) arrive sur la seconde couche F_b , son spin faisant un angle θ avec l'aimantation de F_b . L'électron est soit transmis avec un spin majoritaire, soit réfléchi avec un spin minoritaire. Lorsqu'on fait le bilan du courant de spin de part et d'autre de la couche, on s'aperçoit que le spin perpendiculaire à la couche (proportionnel à $\sin \theta$) a été perdu durant le processus. Le moment angulaire étant conservé à l'échelle microscopique, cela signifie que ce spin a été absorbé par les degrés de liberté magnétiques de la couche, d'où le terme de "transfert de spin". En pratique, lorsque le courant vient directement de la première couche, le transfert de spin tend à aligner les deux aimantations alors que lorsqu'on polarise le pilier dans l'autre sens, on stabilise la configuration anti-parallèle (le courant incident est alors polarisé après réflexion et donc de façon minoritaire). Cet effet de renversement de l'aimantation par un courant électrique est maintenant observé expérimentalement de manière routinière. De nombreux développements visent à le rendre opérationnel dans des mémoires MRAM (magnetic random access memory) ou dans des oscillateurs hyper-fréquence accordés.

Le formalisme de Scattering permet de calculer ces effets de manière quantitative, soit dans la limite balistique, soit dans la limite diffusive. Dans ce dernier cas, nous retrouvons à l'aide des matrices aléatoires une théorie identique à celle obtenue par une voie tout à fait différente dans la théorie dite des circuits¹² (limite semi-classique obtenue à partir du formalisme Keldysh). Des concepts comme l'accumulation de spin, a priori étrangers à notre approche purement quantique, apparaissent ainsi de façon automatique dans le formalisme.

Le cas du nanopilier, assez délicat expérimentalement, est le plus simple du point de vue théorique : la configuration magnétique étant (en première approximation) entièrement fixée par la donnée d'un nombre unique θ . Nous nous sommes intéressé également au cas d'une paroi magnétique [10] dans un fil magnétique. Si la paroi est très longue (de longueur λ_W), on s'attend à ce que les électrons de conduction "suivent" la direction de l'aimantation de façon adiabatique. Cette adiabaticité pourrait avoir pour origine des processus de relaxation inélastique mais nous pensons que c'est la précession de Larmor qui est le mécanisme dominant. Ce mécanisme est schématisé

¹²A. Brataas, G. E.W. Bauer et P. J. Kelly, Phys. Rep. **427**, 157 (2006).

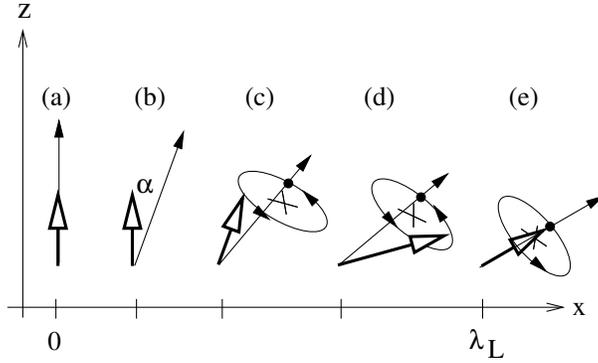


FIG. 8 – Schéma de la précession de Larmor dans une paroi de domaine. Les flèches pleines symbolisent la direction de l’aimantation et les flèches vides celle du spin d’un électron incident. Initialement (a), le spin de l’électron est aligné avec l’aimantation. L’aimantation tourne dans la paroi (b) et un petit angle α se forme avec le spin de l’électron. Ce dernier commence donc à précesser (c) autour de l’aimantation. Après un demi-tour (d), l’angle α avec l’aimantation commence à diminuer. λ_L est la longueur de précession de Larmor dans le système.

Fig. 8 : Initialement (a), le spin d’un électron incident est aligné avec l’aimantation. L’aimantation tourne dans la paroi (b) et un petit angle α se forme avec le spin de l’électron. Ce dernier commence donc à précesser (c) autour de l’aimantation. Cette précession est due au champ d’échange dans le métal magnétique et non au champ magnétique. Après avoir effectué un demi-tour (d), l’angle α commence à diminuer (le spin est de l’autre côté de l’aimantation). L’angle maximum est donc atteint pour $x \approx \lambda_L/2$ où λ_L est la longueur de Larmor du au champ d’échange. On obtient ainsi $\alpha \propto \lambda_L/\lambda_W$ qui tend vers zéro dans la limite des grandes parois. Une conséquence de ce qui précède est que des courants de spin importants oscillent dans la paroi avec comme période λ_L et on s’attend aussi à un fort terme de transfert de spin associé. Cette prédiction de transfert de spin oscillant est actuellement controversée dans la littérature ¹³ et des calculs complémentaires sont prévue pour vérifier la robustesse de l’effet.

¹³J. Xiao, A. Zangwill, et M. D. Stiles Phys. Rev. B **73**, 054428 (2006)

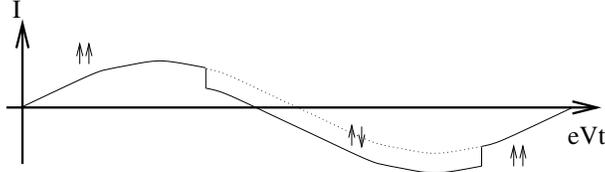


FIG. 9 – Un effet de compétition entre magnétisme et supraconductivité : courant I en fonction du temps dans une jonction supra-ferro-normal-ferro-supra sur laquelle on a appliqué une tension V .

6.3.2 Systèmes hybrides ferromagnétiques-supraconducteurs.

Le phénomène de transfert de spin présente certaines analogies avec la supraconductivité. Par exemple, le courant aux bornes d'une jonction (Josephson) supra-normal-supra est donné par la dérivée de l'énergie libre F vis-à-vis de la différence de phase ϕ entre les deux paramètres d'ordre supraconducteur,

$$I = \frac{2e}{h} \frac{\partial F}{\partial \phi} \quad (5)$$

D'autre part, dans une jonction ferro-normal-ferro, un transfert de spin τ a lieu entre les deux couches ferromagnétiques, de sorte que chaque couche ressent l'autre comme un champ magnétique effectif. Cette interaction d'échange n'est rien d'autre qu'un courant de spin à l'équilibre et prend une forme similaire au courant Josephson,

$$\tau = \frac{\partial F}{\partial \theta} \quad (6)$$

où θ est l'angle entre les deux aimantations. Ces analogies prennent tout leur sens lorsqu'on combine la supraconductivité et le magnétisme dans un seul système. Ces systèmes dits hybrides font entrer les deux ordres en compétition, ce qui donne lieu à des effets intéressants. Le plus remarquable observé à ce jour est sans doute la possibilité de former des jonctions frustrées dites π qui, bouclées sur elles-mêmes, donnent lieu à un courant permanent macroscopique en l'absence de champ extérieur¹⁴.

¹⁴T. Kontos, M. Aprili, J. Lesueur, F. Genêt, B. Stephanidis, et R. Boursier Phys. Rev. Lett. **89**, 137007 (2002)

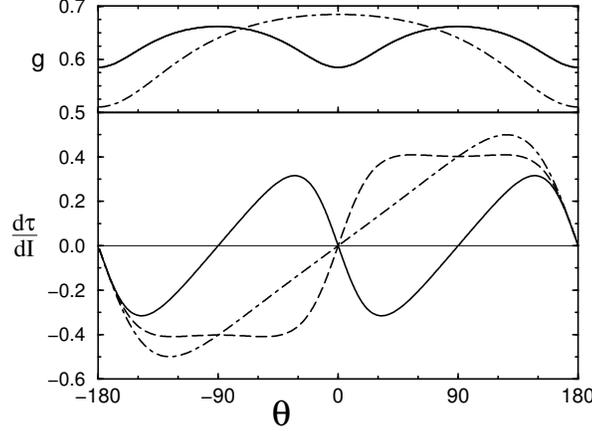


FIG. 10 – Transfert de spin (bas) et conductance (haut) en fonction de l’angle θ entre les deux aimantations pour un nanopilier Co-Cu-Co. La courbe en traits-pointillés correspond au pillier connecté à des électrodes normales tandis que la courbe pleine (traits) correspond à une électrode normale et une électrode supraconductrice (transfert de spin sur la couche magnétique près de l’électrode normale et près de l’électrode supraconductrice respectivement).

Considérons une jonction supra-ferro-normal-ferro-supra [15]. En prenant les dérivées croisées des deux équations précédentes, on obtient,

$$\frac{\partial I}{\partial \theta} = \frac{2e}{h} \frac{\partial \tau}{\partial \phi} \quad (7)$$

si bien que le courant Josephson peut être modulé par la configuration magnétique ou, inversement, l’interaction d’échange peut être contrôlée par la différence de phase supra. On prédit ainsi que si l’on applique une tension alternative aux bornes du système, on module l’interaction d’échange, la configuration magnétique bascule entre les deux configurations parallèles et anti-parallèle, ce qui entraîne des sauts abrupts dans le courant observé (voir Fig.9).

Cette compétition magnétisme/supraconductivité pourrait aussi être observé dans le transfert de spin hors équilibre. Nous traçons (Fig.10) la conductance et le transfert de spin d’un pillier Cobalt-Cuivre-Cobalt en fonction

de l'angle θ (courbe en traits-pointillés). La conductance présente l'habituel maximum (minimum) pour la configuration (anti) parallèle caractéristique de la GMR. Le transfert de spin $\propto \sin \theta$ s'annule pour les deux points fixes $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ dont la stabilité est contrôlée par le signe du courant. Lorsqu'une électrode devient supraconductrice [16, 18], (en baissant la température, par exemple) la situation change complètement (courbes en traits pleins). Le maximum de la conductance se situe pour une configuration perpendiculaire $\theta = \pi/2$. En effet, les configurations $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ sont équivalentes en présence d'un supraconducteur : un électron qui traverse une couche avec une polarisation majoritaire doit la retraverser après la réflexion d'Andreev comme un trou minoritaire. Le même type d'argument peut être développé pour le transfert de spin qui stabilise les configurations alignés ($\theta = 0[\pi]$) ou perpendiculaires ($\theta = \pi/2[\pi]$) selon le signe du courant. Ainsi le renversement de l'aimantation dû au transfert de spin en présence d'une électrode supraconductrice est profondément modifiée et devrait permettre de stabiliser des configurations perpendiculaires.

Les résultats ci-dessus sont peu utiles pour une application directe à l'électronique de spin, qui se concentre principalement sur des dispositifs fonctionnant à la température ambiante. Néanmoins, les supraconducteurs peuvent apporter des éclairages importants. Par exemple, le courant Josephson est très sensible à la transmission d'un spin transverse à l'aimantation de la couche. La plupart des prédictions théoriques s'accordent pour dire que cette transmission doit être petite, mais on n'en possède pas aujourd'hui de mesure expérimentale.

6.3.3 Un système modèle : les petits grains magnétiques.

La théorie du transfert de spin est (souvent tacitement) divisée en deux parties traitées séparément : d'un côté on s'intéresse au transport des électrons de conduction (électrons rapides "s"), de l'autre on étudie la dynamique des degrés de liberté magnétiques (les électrons lents "d" à forte densité d'état). Une des faiblesses des théories actuelles est que les deux parties sont étudiées par des physiciens de deux communautés assez distinctes (transport électronique et micro-magnétisme), si bien que la plupart des articles décrivent avec précision l'un des aspects, mais se contentent d'une description très rudimentaire de l'autre. À l'origine de cette division est une séparation entre les deux échelles de temps, le temps de transport (temps de vol au travers de l'échantillon, typiquement quelques fs) et le temps d'évolution

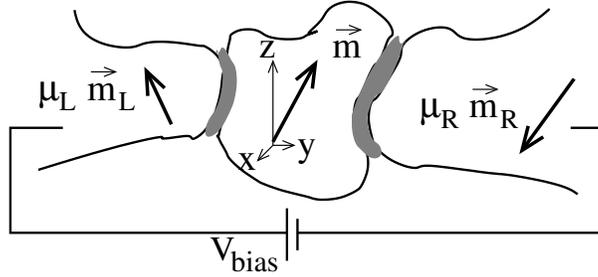


FIG. 11 – Schéma d’un petit grain magnétique d’aimantation \vec{m} connecté à deux électrodes magnétiques par des barrières tunnels. Une tension V_{bias} et un champ magnétique H sont appliqués au système.

typique de l’aimantation (des ns) qui permet, en première approximation, de supposer l’aimantation fixe pour le calcul des propriétés de transport.

Nous avons voulu étudier cette problématique à travers un système modèle, un petit grain magnétique (cobalt, quelques nanomètres) connecté à des électrodes par des jonctions tunnels (voir Fig. 11). Ce système appartient à la fois à la physique mésoscopique (c’est la version magnétique des grains d’or ou d’argent décrit dans la section 6.2.1) et au magnétisme (étudié à travers des expériences de retournement d’aimantation sur microsquid¹⁵ notamment). Le but de cette étude était double : d’une part, nous voulions comprendre comment des phénomènes typiquement mésoscopiques (ici, le blocage de Coulomb) altèrent les effets de l’injection de courant polarisé ; d’autre part, nous voulions étudier un système suffisamment simple pour pouvoir utiliser une approche qui traite les degrés de liberté magnétiques et électroniques sur le même plan et pouvoir ainsi justifier (ou infirmer) l’approche plus phénoménologique utilisée jusqu’alors. Les concepts classiques de l’électronique de spin (accumulation de spin, relaxation, transfert de spin,) apparaissent naturellement dans notre formalisme d’équation maîtresse quantique, et couplés au blocage de Coulomb, donnent lieu à une phénoménologie assez riche. L’équation phénoménologique LLG (“Landau Lifshitz Gilbert”) est ici dérivée de manière systématique à partir de la dynamique quantique de la particule.

De nombreux aspects de ce système peuvent être étudiés [6, 8, 11]. À

¹⁵M. Jamet , W. Wernsdorfer , D. Mailly , V. Dupuis , P. Mélinion et A. Perez, Phys. Rev. Lett **86**, 4676 (2001).

titre d'exemple nous donnons le diagramme de phase à température nulle en présence d'une électrode magnétique en fonction du champ magnétique H et de la tension V_{bias} appliquée au système (Fig.12). A bas champ ($H = -2$ par exemple), on peut faire basculer le système de la configuration alignée (1) à la configuration anti-alignée (-1) de façon similaire à ce que l'on observe dans les nanopiliers. De même, à plus fort champ apparaît la possibilité de stabiliser une phase précessionnelle (SP), autoentretenu. Dans cette phase, une onde de spin uniforme s'établit dans le système. L'énergie dissipée par la précession est compensée par l'arrivée d'électrons qui fournissent de l'énergie au système. Le blocage de Coulomb se mélange ici à la physique du transfert de spin et le diagramme d'hystéresis est assez complexe. Ainsi, dans la région dessinée en blanc, les trois phases (1), (-1) et (SP) sont stables simultanément. Cela se traduit dans la courbe $I(V_{bias})$ par une double hystéresis (courbe en bas de Fig.12) : en variant la tension appliquée, on observe (pour le même champ H) soit une courbe hystéretique, soit une courbe plate, selon qu'on a préparé le système selon (-1) ou (1) à basse tension.

6.4 Gaz quantiques corrélés à deux dimensions.

Les travaux discutés dans cette section sont assez différents de ceux qui précèdent. Le problème est ici beaucoup plus simple (à énoncer) puisqu'il s'agit de décrire le diagramme de phase du gaz d'électrons à deux dimensions et à température nulle. Pour la plupart des gaz 2D usuels, tels qu'on les trouve dans les hétérostructures GaAs/AlGaAs ou dans les MOSFET au silicium de nos ordinateurs, la théorie du liquide de Fermi, et donc toutes les approches développées plus haut s'appliquent parfaitement. Cependant, on sait maintenant fabriquer des gaz 2D de très haute mobilité, ce qui permet d'atteindre des densités n_s extrêmement basses. Basse densité pour des électrons signifie fortes interactions électron-électron. En effet, si la distance typique entre électrons est $a = 1/\sqrt{\pi n_s}$, alors le rapport r_s entre l'énergie électrostatique $e^2/(\epsilon a)$ et l'énergie cinétique $\hbar^2/(2m^*a^2)$ croit lorsque la densité décroît, $r_s = e^2 m^*/(\hbar^2 \epsilon \sqrt{\pi n_s})$. On prédit ainsi qu'à basse densité (à l'instar de l'eau mais contrairement à pratiquement tout les autres éléments) le système cristallise dans une structure triangulaire, dite cristal de Wigner. Les approches analytiques permettent de décrire les limites de hautes ($r_s \ll 1$, liquide de Fermi) et basses ($r_s \gg 1$, cristal de Wigner) densités, mais s'effondrent dans le régime intermédiaire. Vers la fin des années 80, l'arrivée des méthodes numériques de Monte-Carlo quantiques avait permis de

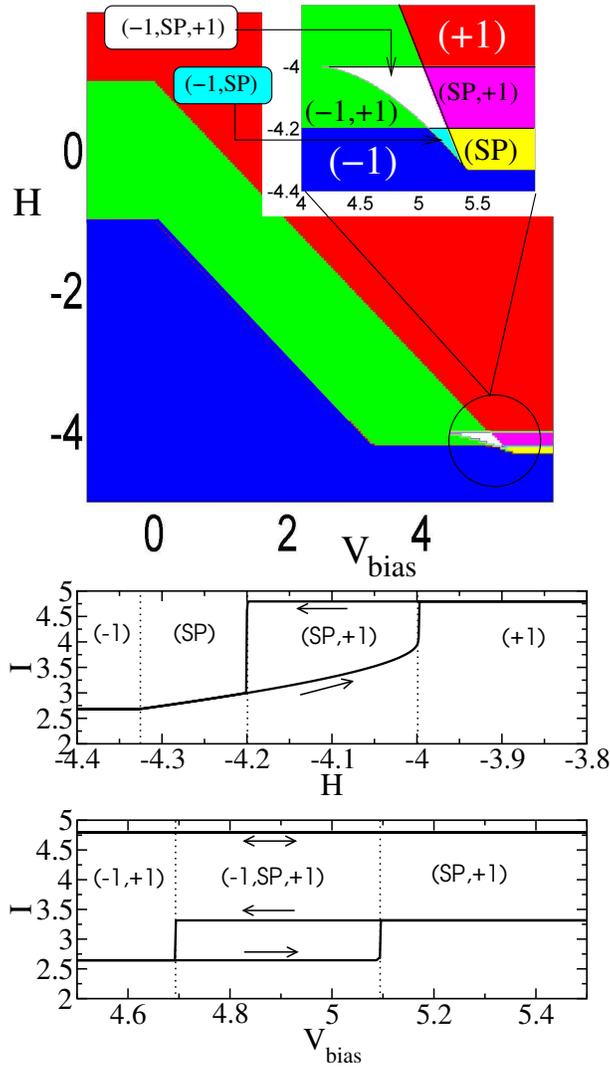


FIG. 12 – En haut : diagramme de phase du grain magnétique en fonction de la tension V_{bias} et du champ magnétique H appliqué. Les différentes couleurs correspondent au domaine de stabilité des 3 phases : (+1) pour la phase où \vec{m} est aligné avec l'électrode, (-1) pour la phase où \vec{m} est anti-aligné avec l'électrode et (SP) pour la phase où \vec{m} effectue une précession autoentretenu (Spin Precession state). En haut à droite : zoom de la partie encerclée. En bas : Caractéristique courant-tension pour $H = -4.1$. Milieu : courant en fonction du champ magnétique pour $V_{bias} = 5.5$.

déterminer¹⁶ la valeur critique de la densité ($r_s \approx 37$) pour laquelle le cristal fondait. La description de la transition liquide-cristal était restée depuis dans un état de statu quo.

La physique des gaz 2D à basse densité a connu un fort regain d'intérêt en 1994 avec l'observation dans des MOSFETs d'une transition métal-isolant. Cette transition allait à l'encontre du paradigme dominant, la théorie d'échelle de la localisation, qui prévoit qu'un désordre infinitésimal est suffisant pour rendre le système isolant. La localisation d'Anderson est un phénomène assez subtil, à ne pas confondre avec un simple piégeage : les électrons ont assez d'énergie pour se propager (classiquement) à travers le paysage désordonné, et la localisation provient d'interférences destructives entre les différents processus de réflexion. Il n'existe pas aujourd'hui de théorie analytique décrivant la localisation d'Anderson à deux dimensions, et encore moins de théorie de l'effet des corrélations électroniques sur cette localisation. La transition dans les MOSFET ayant lieu pour des fortes interactions ($r_s \approx 10$), il était assez naturel de supposer (du moins pour une partie de la communauté, une autre partie tentant d'adapter la théorie de faible ($r_s \ll 1$) interaction en y incorporant des effets exogènes) que cette transition prenait place entre une phase métallique corrélée et une sorte de cristal de Wigner désordonné. Une autre série d'expériences, dans un tout autre contexte, a également contribué à raviver l'intérêt pour la fusion quantique d'un cristal : les expériences de Kim et Chan¹⁷ qui montraient l'apparition à basse température d'une fraction superfluide finie dans l'hélium 4 solide. Ces expériences pourraient indiquer la présence d'une phase supersolide, prévue depuis longtemps dans la littérature mais jamais observée¹⁸. Cet état supersolide se trouverait près du point de fusion, où les défauts du cristal condenseraient pour donner la fraction superfluide observée.

C'est dans ce contexte que, dans le cadre de la thèse de H. Falakshahi, nous avons développé et implémenté un algorithme de calcul Monte-Carlo quantique permettant d'étudier des systèmes corrélés contenant une centaine de particules.

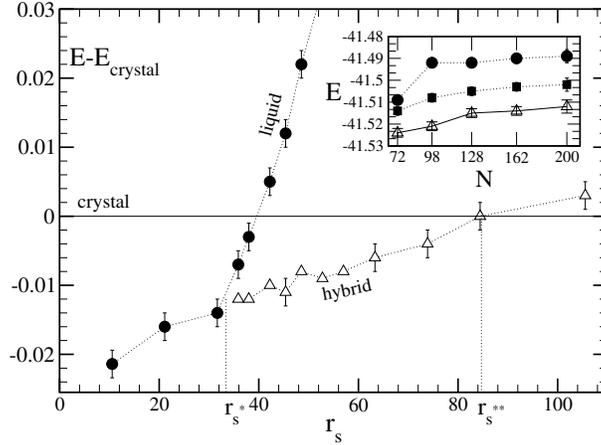


FIG. 13 – Énergie de la phase hybride et liquide mesurée par rapport à l'énergie du cristal en fonction de la force de l'interaction r_s pour un système de 72 particules. Insert : énergie en fonction du nombre N de particules pour les trois phases à $r_s = 42$. De bas en haut, hybride, cristal et liquide.

6.4.1 Fusion du cristal de Wigner.

Notre premier travail [9, 7] a concerné le gaz électronique sans désordre pour lequel nous avons cherché à revisiter la fusion quantique du cristal de Wigner (attendue pour $r_s \approx 37$). Les algorithmes QMC (Monte-Carlo Quantique) que nous utilisons, et qui ont été utilisés par le passé pour caractériser la transition, sont basés sur le principe suivant : on se donne une fonction d'onde variationnelle Ψ_V la plus proche possible du vrai fondamental Ψ_0 du système. Puis on applique (de manière stochastique) l'opérateur de projection $e^{-\tau H}$. Pour τ suffisamment grand, le résultat converge vers le fondamental, $\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\tau H} \Psi_V = \Psi_0$. Pour des bosons, on obtient ainsi le fondamental exact du problème (et un des succès majeurs de ces technique est d'ailleurs obtenu pour l'hélium 4). Pour des fermions, on se trouve face au problème dit "de signe" qui limite drastiquement le rapport signal sur bruit des simulations. La façon classique de contourner le problème est de faire une approximation dite de "fixed node" (fixation de la structure nodale). Dans cette approximation,

¹⁶B. Tanatar and D. M. Ceperley. Phys. Rev. B 39, 5005 (1989).

¹⁷E. Kim and M. H. W. Chan, Nature 427 225 (2004).

¹⁸A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP 29 1107 (1969).

on force la structure nodale (le lieu des points où la fonction change de signe) du fondamental à être identique à celle de la fonction d'onde variationnelle. Le résultat des simulations prend un caractère variationnel : c'est la meilleure fonction d'onde compatible avec la structure nodale de Ψ_V . Ces algorithmes sont, malgré cela, extrêmement précis et à ce jour la quasi intégralité des calculs ab-initio des systèmes électroniques prend comme point de départ les énergies de corrélation obtenues avec ces techniques.

Les fonctions d'onde que nous avons utilisées sont de la forme Slater-Jastrow,

$$\Psi_V(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) = \text{Det} [\phi_i(\vec{r}_j)] \times \prod_{i < j} J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \quad (8)$$

où le déterminant de Slater contient toute la structure nodale et le terme de Jastrow permet d'introduire des corrélations dans le système. En choisissant des ondes planes pour les orbitales $\phi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$ on décrit le liquide de Fermi à bas $r_s \ll 1$. En choisissant des orbitales localisées sur les positions \vec{u}_i classiques du cristal de Wigner, $\phi_i(\vec{r}) = e^{-(\vec{r}-\vec{u}_i)^2/d_V^2}$, on obtient une bonne description du cristal valable à grand $r_s \gg 1$. Il est remarquable que le cristal (liquide) est parfaitement localisé dans l'espace réel (réciproque), si bien que le point de fusion est, en quelque sorte, le point d'incertitude maximum. Nous avons voulu construire une troisième fonction d'onde (dite hybride) qui interpolait entre les deux limites. Notre fonction d'onde a la symétrie du cristal, mais elle est pourtant constituée d'onde de Bloch propagatives. Plus précisément elle est construite à partir d'orbitales $\phi_i(\vec{r})$ correspondant aux ondes de Bloch d'électrons vivant dans un potentiel attractif périodique possédant la symétrie du cristal. Notre résultat principal est illustré par la Fig. 13 qui présente les énergies obtenues à partir des trois fonctions. Pour $30 \leq r_s \leq 60$ la fonction d'onde hybride l'emporte sur le cristal et le liquide. Nous avons caractérisé cette phase hybride à partir de diverses quantités (densité, facteur de structure, voir un exemple Fig. 14) et elle possède des caractéristiques hybrides entre le cristal et le liquide conformément à la façon dont a été construite la fonction d'onde variationnelle correspondante.

Nous pensons avoir ainsi montré que la transition cristal de Wigner se fait en deux temps. Dans un premier temps, seul la symétrie change, au travers une transition vraisemblablement du premier ordre. Dans un second temps, le système se localise pour devenir à grand r_s un cristal au sens où on l'entend classiquement. Notons que nos résultats auraient depuis été vérifiés par deux groupes leader de la communauté du Monte-Carlo quantique, le groupe de

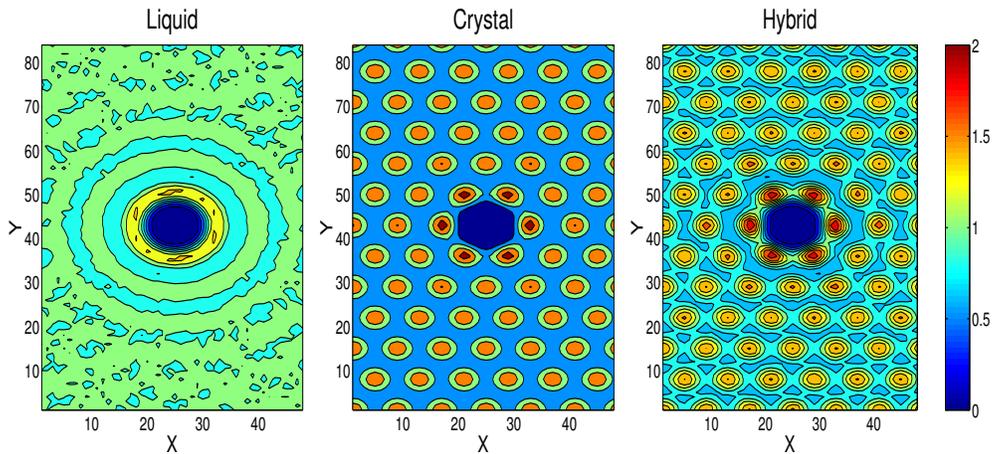


FIG. 14 – Corrélacion densité-densité pour 72 particules à $r_s = 42$. Cela mesure la probabilité de trouver un électron en (X, Y) sachant qu'il y en a un au centre. On constate bien que la phase hybride a des propriétés intermédiaires entre le liquide et le solide.

Ceperley¹⁹ et Senatore²⁰.

6.4.2 Une incursion dans la physique atomique : gaz de bosons en interaction dipolaire.

Après les expériences de Kim et Cham sur la supersolidité dans l'hélium 4 solide, une activité importante s'est concentrée sur le calcul QMC de la fraction condensée et de la fraction superfluide. Aucun calcul n'a conclu à l'existence d'une fraction superfluide finie, et il semble maintenant à peu près certain que le désordre joue un rôle important dans ces expériences. A ce jour, il n'existe aucun modèle continu présentant une phase supersolide. La supersolidité n'a en effet été observée (numériquement) que dans des modèles sur réseau où le cristal est artificiellement stabilisé par un réseau sous-jacent.

Nous avons tenté [5] de trouver la supersolidité dans un autre système de bosons : les atomes froids dipolaires. On sait en effet refroidir maintenant des atomes bosoniques ayant des dipôles (électriques) assez importants. L'observation de la supersolidité dans un tel système serait beaucoup plus directe

¹⁹M. Holzmann, communication privée

²⁰V. Dobrosavljevic, communication privée

que dans l'hélium : on peut mesurer à la fois le facteur de structure dans l'espace réel et le pic de condensation de Bose dans l'espace des vitesses. Nous avons montré que les paramètres nécessaires pour observer la fusion quantique se situent à l'intérieur de la fenêtre accessible expérimentalement. En revanche, nous n'avons pas pu conclure quant à la présence d'une éventuelle phase supersolide (qui, si elle existe, possède une fraction superfluide extrêmement petite).

Un produit dérivé de ce travail est une formule [3] pouvant être très utile pour la communauté QMC. Le résultat principal d'une simulation QMC est la courbe $E(\tau)$ de l'énergie en fonction du temps imaginaire de projection, voir Fig. 15. On part de l'énergie variationnelle $E(0)$, puis l'énergie décroît assez vite pour enfin saturer à l'énergie du fondamental E_0 . Une bonne fonction d'onde variationnelle a non seulement une énergie basse, mais assure en plus une convergence rapide vers le fondamental. Notre formule donne à la phrase précédente un sens plus précis : on montre en effet que l'aire sous la courbe $E(\tau)$ est simplement reliée au recouvrement de la fonction d'onde variationnelle avec le fondamental :

$$|\langle \Psi_V | \Psi_0 \rangle|^2 = \exp - \int_0^\infty [E(\tau) - E_0] d\tau \quad (9)$$

Cette formule devrait permettre de donner un critère absolu sur la qualité d'une fonction d'onde variationnelle. Dans une approche variationnelle classique, on minimise l'énergie E_V ou la variance de l'énergie σ_V^2 d'une fonction d'onde dépendant d'un certain nombre de paramètres. Si l'on possède une estimation de E_0 (par un run QMC, par exemple), le recouvrement est donné (en général) avec une bonne approximation par $(E_V - E_0)^2 / \sigma_V^2$ qui est donc la bonne quantité à optimiser.

6.4.3 Localisation d'Anderson et problème à N corps.

Si la transition Métal-Isolant observée dans les MOFSETs est bien une transition entre un métal corrélé ($r_s \leq 10$) et un cristal désordonné ($r_s \geq 10$), la question théorique la plus aigüe concerne la nature de cette phase métallique. Nous avons donc cherché comment, en partant de l'isolant d'Anderson ($r_s = 0$), les corrélations électroniques peuvent affecter les propriétés de l'isolant [2].

Sans interaction, la théorie d'échelle de la localisation postule que si l'on connaît la conductance $g(L)$ du système de taille L , alors la conductance

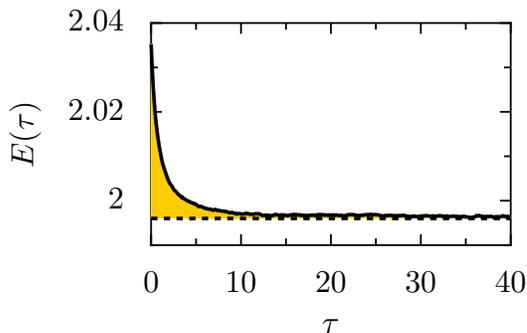


FIG. 15 – Courbe $E(\tau)$ typique obtenu en QMC. L’aire sous la courbe est le logarithme du recouvrement de la fonction d’onde variationnel avec le fondamental du système.

du système dilaté d’un facteur b est donnée par une fonction de $g(L)$ et b seulement :

$$g(bL) = F[g(L), b] \quad (10)$$

Ou de façon équivalente,

$$\beta(g) \equiv \frac{d \log g}{d \log L} \quad (11)$$

est une fonction de g seulement. Pour un système vérifiant la loi d’Ohm à d dimensions, $g = \sigma L^{d-2}$, on a $\beta(g) = d - 2$ constant. Les corrections de localisation faibles vérifient aussi la loi d’échelle et on a pour $g \gg 1$,

$$\beta(g) = d - 2 - \frac{A_d}{g} \quad (12)$$

(A_d est une constante, $A_2 = 1/\pi$). A fort désordre, le système se localise et la conductance décroît exponentiellement avec la taille, $g = g_0 e^{-L/\xi}$, d’où,

$$\beta(g) = \log \frac{g}{g_0} \quad (13)$$

La théorie d’échelle prédit donc dans ce cas que g_0 est une constante indépendante du désordre.

L’allure générale de la courbe $\beta(g)$ est donnée Fig. 16. A deux dimensions, la prédiction principale de cette théorie est l’absence d’état métallique : un désordre infinitésimal suffit à rendre le système isolant. Un effort numérique

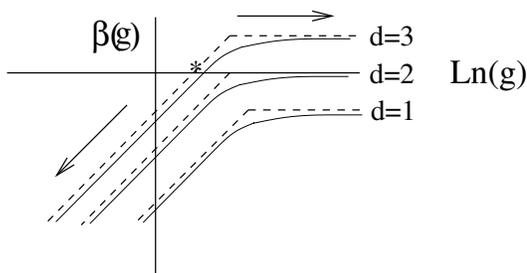


FIG. 16 – Allure générale de la loi d'échelle $\beta(g)$ sans interaction. Les lignes en pointillés correspondent aux asymptotes décrites dans le texte. A une et deux dimensions le système est toujours isolant : $\beta(g) < 0$ et la conductance diminue lorsqu'on augmente la taille du système (comme indiqué par la flèche). A trois dimensions une transition métal-isolant est prédite : $\beta(g)$ change de signe de part et d'autre du point (*) de transition.

considérable a permis, dans les années 80 – 90, de valider la théorie d'échelle du problème libre (sans interaction).²¹

Nous avons voulu comprendre ce qui advenait à la localisation et à la théorie d'échelle en présence des interactions électroniques. La difficulté de ce travail est double. Tout d'abord, il nécessite une méthode numérique permettant d'accéder à l'état fondamental d'un assez grand nombre de particules plongées dans un potentiel désordonné : il est en effet capital pour établir une loi d'échelle de comprendre comment évolue le système lorsque sa taille varie. Pour cela, notre méthode QMC possède un avantage important en exploitant pleinement le fait que le fondamental sans interaction peut être calculé exactement (en résolvant le problème désordonné à un corps, puis en formant un déterminant de Slater). Si l'on reste à des interactions relativement modestes ($r_s \leq 7$ dans notre cas), on possède ainsi un bon point de départ pour échantillonner le vrai fondamental du système. La deuxième difficulté vient de ce que la localisation ne s'observe pas dans les quantités thermodynamiques moyennes. Un exemple un peu trivial est la densité de particules qui est uniforme si l'on moyenne sur un ensemble d'échantillons. Pour un échantillon unique, elle sera également (à peu près) uniforme si la longueur de localisation ξ est grande devant la distance a entre particules

²¹J.-L. Pichard et G. Sarma, J. Phys. C **14** L127 (1981). B. Kramer and A. Mackinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

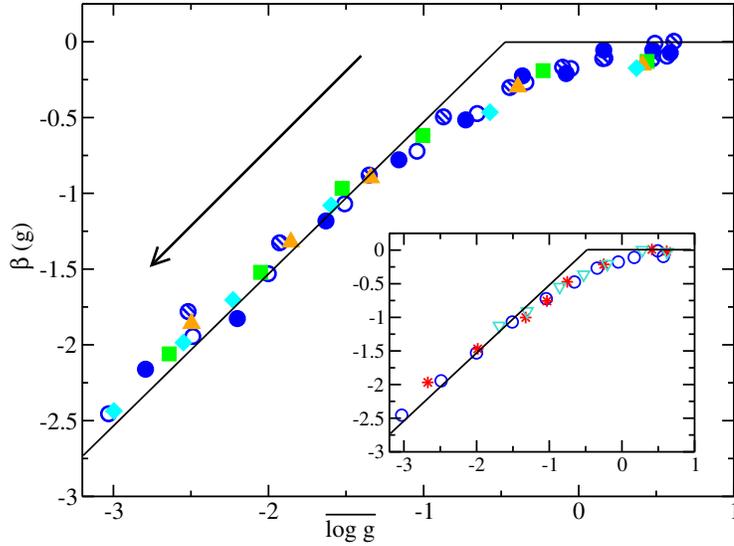


FIG. 17 – Loi d'échelle $\beta(g)$ obtenue numériquement pour des fermions polarisés à deux dimensions. Les différents points correspondent à différentes tailles, densités électroniques, désordres, nombres de particules, et interaction $0 \leq r_s \leq 7$. La flèche indique le sens de l'évolution lorsqu'on augmente le désordre et/ou l'interaction. Les lignes correspondent aux asymptotes décrites dans le texte. Insert : idem pour d'autres paramètres.

(ce qui est le régime pertinent pour nous. $\xi/a \ll 1$ correspond à la limite classique d’Efros-Shlovskii pour laquelle les interactions renforcent le caractère isolant en déplaçant la densité d’état.) Notre mesure de la localisation est basée sur la “conductance de Thouless” qui relie le courant I circulant dans le système à un petit flux Aharonov-Bohm ϕ appliqué, $I = g\phi$. Dans de nombreux cas, g correspond bien à la conductance du système et quoi qu’il en soit, c’est une bonne mesure de la localisation d’Anderson. g peut être calculé en QMC par l’intermédiaire de la constante de diffusion du centre de masse en temps imaginaire.

Le résultat principal de ce travail est présenté Fig. 17, où nous avons tracé la fonction $\beta(g)$ obtenu par QMC pour diverses tailles, densités électroniques, désordres, nombre de particules, et r_s . Nous trouvons pour des *fermions polarisés* (i.e. sans spin) que la théorie d’échelle reste valable en présence des interactions électroniques. L’effet de l’interaction est de rendre le système encore plus isolant en diminuant la longueur de localisation. Ce résultat est en accord avec la littérature expérimentale (un fort champ magnétique parallèle au plan des électrons détruit la phase métallique) et théorique (les calculs à faible désordre semblent obéir à la théorie d’échelle). L’étude du système non polarisé est en chantier actuellement. Des résultats préliminaires indiquent que, contrairement au cas localisé, l’interaction tend à augmenter la conductance de Thouless.

6.5 Conclusion et perspectives

A moyen terme, je compte maintenir mes deux lignes de recherche qui sont assez complémentaires : d'un côté (problème à N corps désordonné), on cherche à répondre à des questions difficiles mais bien posées, au travers d'approches assez lourdes. De l'autre (électronique de spin, transport quantique), le cadre théorique est plus simple et plus ouvert, et l'on cherche là à inventer de nouvelles questions, de nouvelles problématiques. L'électronique de spin possède également un caractère très appliqué et il est relativement aisé de se rapprocher des résultats expérimentaux.

Dans les paragraphes qui suivent, je présente les différentes lignes de recherche que je compte poursuivre dans les prochaines années.

6.5.1 Du transport polarisé à la dynamique magnétique

La physique du transfert de spin dans les systèmes magnétiques se trouve actuellement face à une difficulté que je suis tenté de qualifier de sociologique : coté transport, deux types de théories (approche quantique et approche diffusive) sont en concurrence. L'approche diffusive, plus ancienne, a atteint sa maturité, et permet maintenant de prédire les magnétorésistances observées expérimentalement avec une bonne précision. L'approche quantique est cependant capable de capturer certains effets qui ne sont pas contenus dans son homologue classique. A cette dualité se rajoute un troisième aspect, la dynamique de l'aimantation, qui est décrit par des approches de type micromagnétisme. En pratique, la plupart des études du transfert de spin sont faites par des équipes maîtrisant un des trois aspects, d'où une description assez fine de certains points et beaucoup plus grossière d'autres. C'est ainsi que l'immense majorité des articles traitant du transport se limitent à une description macrospin de la dynamique de l'aimantation et d'autre part les études micromagnétiques utilise une théorie extrêmement rudimentaire du transfert de spin.

Mon approche pour ce problème est de mettre en place une double collaboration. A l'aide du code de transport quantique introduit précédemment, nous allons mettre en place une plate-forme numérique pour calculer la magnétorésistance et le transfert de spin de structures magnétiques. Une première collaboration avec des experts de l'approche diffusive devrait nous permettre de tabuler les modèles quantiques pour les différents matériaux utilisés expérimentalement (résistivité, résistances d'interface, longueurs de diffusion

de spin,...). Au travers d'une deuxième collaboration avec des experts du de la dynamique magnétique, ce code sera intégré au micromagnétisme de façon à pouvoir effectuer des simulations complètes de l'ensemble des degrés de liberté en jeu dans les expériences.

Une fois mise en place, cette "plate-forme" devrait nous permettre d'étudier de nombreuses questions. Parmi les plus urgentes, citons l'effet de l'hétérogénéité spatiale de l'aimantation (bien présente mais le plus souvent ignorée) sur le transfert de spin, l'effet de l'interaction spin-orbit (dont on sait par ailleurs qu'elle est la source principale de relaxation de spin) sur le transfert de spin ou encore les jonctions tunnels magnétiques. A plus long terme, on devrait parvenir à un accord quantitatif avec les expériences sur, par exemple, les courants seuils nécessaires pour le basculement de l'aimantation dans les MRAMs.

6.5.2 Transport quantique hyperfréquence et électronique de spin

Une source d'inspiration importante pour l'électronique de spin vient des développements de la physique mésoscopique, qui très souvent possèdent des analogies directes avec les systèmes magnétiques. Citons par exemple l'interaction d'échange entre deux couches magnétiques qui est l'analogue des courants permanents dans les anneaux mésoscopiques (il s'agit ici d'un courant de spin présent à l'équilibre thermodynamique) ou, plus récemment, la découverte d'un mécanisme de relaxation par "pompage de spin" qui correspond formellement à la pompe quantique des billards mésoscopiques. Bien d'autres effets mésoscopiques, et en particulier ceux dépendant du temps (bruit de partition, capacité quantique, courant photo-assisté...) n'ont pas encore leur analogue en électronique de spin.

Nous travaillons actuellement à la mise en place d'un formalisme général pour traiter des systèmes dépendants du temps en adaptant les travaux effectués autour de M. Buttikker au formalisme des fonctions de Green hors équilibre. Ce formalisme, couplé à notre code de calcul de transport quantique, devrait nous fournir un cadre pour travailler sur de nombreux aspects encore peu explorés. Citons pêle-mêle, le rôle des fluctuations temporelles de l'aimantation dans le transfert de spin, le transport à haute fréquence ou le pompage de spin hors équilibre.

6.5.3 Quelques autres développements autour de notre code de transport quantique

Le code de transport quantique décrit dans la section 6.2.3 a été conçu avec un grand souci de versatilité et de facilité d'utilisation. Nous avons voulu rompre avec le paradigme habituel des calculs numériques (écrire le plus vite possible un programme pour résoudre un problème donné) pour concevoir un outil dont on espère qu'il servira à de nombreux groupes pendant de nombreuses années. C'est ainsi que, outre les applications en électronique de spin mentionnées plus haut, nous nous attachons à déployer le code directement dans des équipes théoriques ou expérimentales, d'abord à l'intérieur de notre laboratoire, puis éventuellement à l'extérieur.

Une application à l'effet de proximité dans des jonctions normal - supraconducteur est ainsi en cours d'étude (expérience de spectroscopie tunnel à très basse température de P. Joyez). Le code est aussi utilisé à Trondheim (Norvège) pour étudier la réflexion d'Andreev croisée dans du graphène. Une collaboration a commencé avec le groupe de V. Falko (Lancaster) pour étudier le minimum de résistivité dans l'équation de Dirac (graphène également). De façon générale nous cherchons à encourager des collaborations avec des groupes qui souhaiteraient utiliser notre "boîte à outil quantique".

6.5.4 Le gaz électronique bidimensionnel désordonné

Pour le problème à N corps, il est beaucoup plus difficile de se projeter dans l'avenir. A court terme, nous allons continuer à explorer le lien entre la localisation d'Anderson et les corrélations électroniques. Le sujet est presque vierge et potentiellement d'une grande portée expérimentale. Une étude en cours concerne le gaz d'électrons non polarisé. Un travail récent de Finkelstein ²² montre le rôle important que peut avoir la dégénérescence de vallée (présente dans les MOSFETs mais pas dans les autres types de gaz). Nous observons également le rôle crucial de ce degré de liberté qui semble permettre de stabiliser une phase métallique.

Notre technique nous permet de faire une chose jusqu'ici difficile et d'explorer de façon systématique et fiable le diagramme de phase du gaz d'électrons désordonné à température nulle. Nous allons dans les deux prochaines années continuer cette exploration et en particulier les régimes proches de la cristallisation de Wigner.

²²A. Punnoose et A. M. Finkelstein, Science **310**, 289 (2005)

Les cristaux quantiques de bosons, comme l'Helium 4, solide sont également très intéressants, en particulier depuis l'observation d'une fraction superfluide (supersolidité) par Kim et Chan. Nous avons cherché sans succès cette supersolidité dans des cristaux "purs" d'atomes froids, et il semble maintenant assez clair que les défauts du cristal jouent un rôle important. Travailler sur la théorie de la supersolidité fait partie de mes projets à plus long terme.

6.5.5 Algorithmes Monte-Carlo quantiques et problème de signe

Un aspect en amont du problème ci-dessus est le développement des techniques permettant d'étudier (si possible de façon contrôlée) le problème à N corps. Pour le Monte-Carlo quantique, une difficulté importante concerne le contrôle du "problème de signe". Cette difficulté n'est pas présente pour les systèmes bosoniques et est associée à l'antisymétrie des fermions. Elle entraîne, de façon générale, une dégradation catastrophique du rapport signal sur bruit dans les simulations. Jusqu'à présent, nous nous sommes dégagés de cette difficulté grâce à l'approximation dite de "fixed node". Cette approximation, bien que très répandue, est cependant difficile à contrôler.

Diverses pistes ont été proposées pour résoudre ce problème. Nous allons nous intéresser, pour des modèles très simples, d'abord au problème de signe lui-même (dont on sait par exemple qu'il est extrêmement sensible à la base dans laquelle sont faits les calculs) puis aux diverses possibilités pour le juguler.

Table des figures

1	Spectroscopie d'un grain métallique nanométrique	18
2	Fluctuations mésoscopiques du facteur gyromagnétique	19
3	Billards présentant des résonances Fano	20
4	Exemple de résonance Fano	21
5	Interféromètre Mach-Zender électronique	22
6	Barre de hall en graphène	24
7	Transfert de spin	25
8	Précession de Larmor dans une paroi magnétique	27
9	Jonction Josephson SFNFS	28
10	Transfert de spin dans un système FNFS	29
11	Effet tunnel au travers un petit grain magnétique	31
12	Diagramme de phase d'un petit grain magnétique	33
13	Phase hybride entre le liquide de Fermi et le cristal de Wigner	35
14	Fonctions de corrélation densité-densité dans la phase hybride	37
15	Énergie en temps imaginaire dans un calcul de Monte-Carlo quantique	39
16	Schéma de la théorie d'échelle de la localisation	40
17	Loi d'échelle de la localisation pour un système corrélé	41

Références

- [1] K. Kazymyrenko and X. Waintal. A knitting algorithm for calculating green functions in quantum systems. *submitted to PRL, condmat/0711.3413*, 2007.
- [2] G. Fleury and X. Waintal. A numerical finite size scaling approach to many-body localization. *to appear in PRL, condmat/07092244*, 2007.
- [3] C. Mora and X. Waintal. Variational wave functions and their overlap with the ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 99, 2007.
- [4] B. Huard, H. Pothier, N. O. Birge, D. Esteve, X. Waintal, and J. Ankerhold. Josephson junctions as detectors for non-gaussian noise. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 16, 2007.
- [5] C. Mora, O. Parcollet, and X. Waintal. Quantum melting of a crystal of dipolar bosons. *Phys. Rev. B*, 76, 2007.
- [6] O. Parcollet and X. Waintal. Spin torque in a nanomagnet coupled to noncollinear ferromagnetic electrodes. *Phys. Rev. B*, 73, 2006.
- [7] X. Waintal. On the quantum melting of the two-dimensional wigner crystal. *Phys. Rev. B*, 73, 2006.
- [8] X. Waintal and O. Parcollet. Current induced spin torque in a nanomagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 94, 2005.
- [9] H. Falakshahi and X. Waintal. Hybrid phase at the quantum melting of the wigner crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 94, 2005.
- [10] X. Waintal and M. Viret. Current induced distortion of a magnetic domain wall. *Europhys. Lett.*, 65, 2004.
- [11] X. Waintal and P.W. Brouwer. Tunable magnetic relaxation mechanism in magnetic nanoparticles. *Phys. Rev. Lett.*, 91, 2003.
- [12] J.-L. Pichard, G. Benenti, G. Katomeris, F. Selva, and X. Waintal. From the fermi liquid towards the wigner solid in two dimensions. *Exotic states in Quantum Nanostructures edited by S.Sarkar*, 2002.
- [13] S. Adam, M.L. Polianski, X. Waintal, and P.W. Brouwer. Magnetic-field dependence of energy levels in ultrasmall metal grains. *Phys. Rev. B*, 66, 2002.
- [14] S. Adam, P.W. Brouwer, J.P. Sethna, and X. Waintal. Enhanced mesoscopic fluctuations in the crossover between random-matrix ensembles. *Phys. Rev. B*, 66, 2002.

- [15] X. Waintal and P.W. Brouwer. Magnetic exchange interaction induced by a josephson current. *Phys. Rev. B*, 65, 2002.
- [16] X. Waintal and P.W. Brouwer. Spin torque in a magnetic trilayer coupled to a superconductor. *Proceedings of the XXXVIIth Rencontres de Moriond edited by Thierry Martin and Gilles Montambaux*, 2001.
- [17] Y. Oreg, P.W. Brouwer, B. Halperin, and X. Waintal. Spin configuration and electron-electron interaction in mesoscopic systems. in "*Nano-Physics and Bio-Electronics*" edited by T. Chakraborty, F. Peeters, and U. Sivan, 2001.
- [18] X. Waintal and P.W. Brouwer. Current induced switching of magnetic domains to a perpendicular configuration. *Phys. Rev. B, Rapid Com.*, 63, 2001.
- [19] A.A. Clerk, X. Waintal, and P.W. Brouwer. Fano resonances as a probe of phase coherence in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 86, 2001.
- [20] X. Waintal, E.B. Myers, P.W. Brouwer, and D.C. Ralph. Role of spin-dependent interface scattering in generating current-induced torques in magnetic multilayers. *Phys. Rev. B*, 62, 2000.
- [21] P.W. Brouwer, X. Waintal, and B.I. Halperin. Fluctuating spin g-tensor in small metal grains. *Phys. Rev. Lett.*, 85, 2000.
- [22] G. Benenti, X. Waintal, and J.-L. Pichard. Signatures of an intermediate 2d coulomb phase at low temperature. *Europhys. Lett.*, 51, 2000.
- [23] X. Waintal, G. Benenti, and J.-L. Pichard. Delocalized coulomb phase in two dimensions. *Europhys. Lett.*, 49, 2000.
- [24] G. Benenti, X. Waintal, J-L Pichard, and D. Shepelyansky. Compressibility crossover and quantum opening of a gap for two-dimensional disordered clusters with coulomb repulsion. *Eur. Phys. J. B*, 17, 2000.
- [25] X. Waintal, G. Benenti, and J.-L. Pichard. Metallic phase between the fermi glass and the wigner crystal in two dimensions. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 8, 1999.
- [26] G. Benenti, X. Waintal, and J.-L. Pichard. A new quantum phase in two dimensions. *Proceedings of the XXXIVth Rencontres de Moriond "Quantum Physics at Mesoscopic Scale"*, 1999.
- [27] G. Benenti, X. Waintal, and J.-L. Pichard. A new quantum phase between the fermi glass and the wigner crystal in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 83, 1999.

- [28] J.-L. Pichard, D. Weinmann, S. De Toro Arias, R. A. Jalabert, P. Schmitteckert, X. Waintal, , and A. Wobst. Interplay disorder-interaction in one dimensional quantum models. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 7, 1998.
- [29] S. De Toro Arias, X. Waintal, and J.-L. Pichard. Two interacting particles in a disordered chain iii : Dynamical aspects of the interplay disorder-interaction. *Eur. Phys. J. B.*, 10, 1999.
- [30] X. Waintal, D. Weinmann, and J.-L. Pichard. Two interacting particles in a disordered chain ii : Critical statistics and maximum mixing of the one body states. *Eur. Phys. J. B.*, 7, 1999.
- [31] X. Waintal and J.-L. Pichard. Two interacting particles in a disordered chain i : Multifractality of the interaction matrix elements. *Eur. Phys. J. B.*, 6, 1998.