HAL
open science

Transport de spin dans des matériaux magnétiques en couches minces, par simulations Monte Carlo

Yann Magnin

To cite this version:

Yann Magnin. Transport de spin dans des matériaux magnétiques en couches minces, par simulations Monte Carlo. Physique Numérique [physics.comp-ph]. Université de Cergy Pontoise, 2011. Français. NNT : . tel-00737547

HAL Id: tel-00737547

https://theses.hal.science/tel-00737547

Submitted on 2 Oct 2012

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.

Université de Cergy-Pontoise
U.M.R. 8089
Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation

Thèse

Présentée pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE CERGY-PONTOISE
Spécialité : Physique

par :

Yann Magnin

Titre :

Tranport de spin dans des matériaux magnétiques en couches minces par simulations Monte Carlo

Soutenance le 03/11/2011

Composition du jury

Hung The Diep	Université Cergy-Pontoise	(Directeur)
Alphonse Finel	Université Cergy-Pontoise	(Président)
Abdelkader Kara	University of Central Florida Orlando	(Rapporteur)
Jorge Linares	Université de Versailles - St. Quentin en Yvelines	(Rapporteur)
Dominique Mouhanna	Université de Paris VI - Pierre et Marie Curie	(Examinateur)

Table des matières

Introduction générale **1**

1 Introduction à la résistance électrique des matériaux **7**
1.1 La théorie de Drude appliquée aux métaux 7
1.1.1 Limitations classique/quantique de la théorie de Drude 8
1.2 Théorie semi-classique de la conduction des électrons dans les métaux . . 11
1.2.1 Description du modèle 11
1.2.2 Limitation de la théorie semi-classique 12
1.2.3 Magnétorésistance 13
1.3 Equation générale du transport 15
1.3.1 Equation de Boltzmann 15
1.3.2 Approximation du temps de relaxation 17
1.4 Méthode Monte Carlo & physique de la matière condensée 18
1.4.1 Eléments de physique statistique 18

2 Modèles théoriques **21**
2.1 Introduction 21
2.2 Modèles et outils théoriques de transport dans les métaux magnétiques . 22
2.2.1 Relier l'ordre magnétique à la résistivité magnétique 22
2.2.2 Utilisation de la fonction de corrélation comme probabilité de diffusion 23
2.3 Modèles théoriques de transport dans les semiconducteurs 30
2.3.1 Localisation et désordre sur réseau 33
2.4 Comportement des résistivités des quatre familles de matériaux magnétiques 35
2.5 Conclusion 37

3 Simulation Monte Carlo appliquée aux modèles de transport de spins **39**
3.1 Contexte de l'étude 39
3.2 Choix des simulations Monte Carlo 43
3.2.1 Principe de la méthode Monte Carlo 44
3.3 Procédure et dynamique Monte Carlo sur réseau 45
3.4 Procédure et dynamique de transport de spin : Monte Carlo hors réseau . 50
3.5 Algorithme du programme Monte Carlo 55
3.6 Description des différentes interactions du modèle 55

4 Résistance magnétique dans des films minces magnétiques **59**
4.1 Films minces ferromagnétiques 59
4.1.1 Introduction 59

4.1.2 Interprétation de la courbe de résistance magnétique en fonction de la température . . . 61
4.1.3 Influence des différents paramètres sur les courbes de résistances magnétiques . . . 70
4.1.4 Transport de spins polarisés et non-polarisés . . . 77
4.1.5 Temps de relaxation et influence du ralentissement critique du réseau sur la résistance . . . 79
4.2 Résistance magnétique et dépendance en champ magnétique . . . 83
4.2.1 Discussion . . . 87
4.3 Films minces antiferromagnétiques . . . 88
4.3.1 Introduction . . . 88
4.3.2 Discussion autour d'une courbe de résistance pour un matériau antiferromagnétique . . . 88
4.3.3 Effet de D_1 sur les mécanismes de transport à basse température et autour de la température de Néel . . . 91
4.3.4 Influence du temps de relaxation sur le pic de résistance à la température de Néel . . . 96
4.3.5 Discussion . . . 97
4.4 Conclusion . . . 98

5 Simulation d'un système réel $MnTe$, comparaison expérimental/théorique 101
5.1 Semiconducteur antiferromagnétique MnTe. . . . 101
5.2 Etude du matériau $MnTe$ par utilisation de l'équation de Boltzmann et de la distribution de clusters . . . 102
5.3 Etude des propriétés de transport de $MnTe$ par simulation Monte Carlo directe . . . 105
5.3.1 Moyenne des observables du réseau . . . 105
5.3.2 Calcul de la résistivité de $MnTe$ par simulation Monte Carlo . . . 106
5.4 Calcul des grandeurs caractéristiques et justification des hypothèses du modèle de transport . . . 108
5.5 Conclusion . . . 110

6 Transport et frustration 111
6.1 Introduction . . . 111
6.2 Description du réseau cubique à faces centrées antiferromagnétique . . . 112
6.3 Transport de spin à travers un réseau frustré cubique à faces centrées . . . 113
6.3.1 Interprétation de la résistance magnétique de l'état dégénéré (1) . . . 114
6.3.2 Interprétation de la résistance magnétique de l'état dégénéré (3) . . . 119
6.4 Effets de surfaces . . . 121
6.5 Résistance avec modèle de Heisenberg sur le réseau frustré FCC antiferromagnétique . . . 122
6.6 Discussion . . . 126
6.7 Conclusion . . . 127

7 Résistance magnétique dans des multicouches magnétiques **131**
7.1 Introduction à la magnétorésistance 131
7.2 Principe de contrôle des multicouches et de la magnétorésistance géante . 132
7.3 Configuration CPP 133
7.3.1 Comportement en température et sous application d'un champ magnétique des observables du réseau 135
7.3.2 Transport et dynamique des électrons dans une configuration CPP 137

Conclusion générale **145**

Liste des publications **149**

Bibliographie **151**

Table des figures

1 *Courbes de résistivités normalisées par la résistivité à la température de Debye pour différents échantillons métalliques, en fonction de la température normalisée par la température de Debye. Courbe tirée du livre de Mizutani et al. [79].* 2

2 *A-B-C : courbes de résistances en fonction de la température pour les métaux magnétiques purs de gadolinium (A), dysprosium (B), erbium (C). Ces courbes sont tirées de l'article de S. Legvold [59], les insets sont des grocissements réalisés autour de la température critique. D : courbe de résistance d'un semiconducteur magnétique $La_{1-x}Ca_xMnO_3$, tirée de l'article de J. J. Neumeier et al. [86].* 4

2.1 A : *Résistivité d'un échantillon de nickel en fonction de la température. La résistivité ne présente pas de pic à T_c, seule sa dérivée par rapport à la température en présente un. Courbe tirée de l'article de Schwerer et al. [102].* B : *Résistivité du semiconducteur $La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO_3$ pour différentes stœuchiométries x en fonction de la température. Cette courbe est tirée de l'article de Souza et al. [107].* 22

2.2 *Courbes inverses des temps de relaxation renormalisés par la méthode de De Gennes et Friedel sans prise en compte des corrélations [24]. Les comparaisons sont effectuées pour Gd (traits pointillés) et AuMn (ligne discontinue).* 24

2.3 *Courbes des temps de relaxation renormalisés inverses par la méthode de De Gennes et Friedel avec prise en compte des corrélations [24]. Les courbes sont tracées pour différentes valeurs de k_0d.* 25

2.4 *Comportement qualitatif de l'évolution de la fonction de corrélation spin-spin du réseau, fonction de la longueur d'onde K avec a le paramètre de maille [39].* 26

2.5 *Courbes de résistivité en fonction de la température, avec variation de plusieurs paramètres. Les courbes présentées sont issues de l'article de Kataoka [55]. A : Variation de la densité de porteurs. B : Variation de la longueur de libre parcours moyen. C : Variation du paramètre d'instabilité du réseau.* 29

2.6 *Différents comportements de résistivité exprimés par Alexander [3] pour les métaux et semiconducteurs ferromagnétiques et antiferromagnétiques.* 31

2.7 *Mobilité des électrons à travers une structure ferromagnétique pour un semiconducteur non-dégénéré. Courbe tirée de l'article de Haas [46].* 32

2.8 1. *Mobilité des électrons à travers une structure ferromagnétique pour un semiconducteur non-dégénéré, courbe tirée de l'article de Haas [46]*, 2. *Résistivité mesurée expérimentalement pour $MnTe$ courbe tirée de l'article de He et al. [47].* 32
2.9 *Courbes de résistance en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétique. Figure A correspond à des courbes expérimentales extraites de l'article de Li [61] sur la caractérisation de $La_{0.67-x}Y_xCa_{0.33}MnO_3$ de stoechiométrie $x = 0.10$. Figure B présente les courbes issues de la théorie de transport par localisation de Zarand dans les semiconductuers dilués [126]. Figure C montre les courbes issues de l'article de Sen et al. [128] calculées à partir des simulations Monte Carlo basées sur le modèle à deux bandes.* 35

3.1 *Représentation d'une maille BCC (cubique centré). Le site i interagit avec les sites j premiers voisins (lignes rouges). Les sites noirs représentent des spins sur réseau orientés up et les site blancs les spins du réseau orientés down.* 46
3.2 *Energie par spin d'une réseau FCC en fonction du temps (pas) Monte Carlo. La courbe verte correspond à $T \ll T_c$, la courbe noire à $T \sim T_c$, la courbe rouge à $T \gg T_c$. Pour chaque courbe, nous partons d'un état initial ferromagnétique (état fondamental de la structure), l'énergie est calculée comme la somme des interactions entre spins premiers voisins, l'énergie de l'état fondamental est $E = -6$.* 47
3.3 *Aimantation M, énergie interne E, capacité calorifique C_v et susceptibilité χ, moyennées par simulation Monte Carlo, en fonction de la température.* 48
3.4 *Structure FCC ferromagnétique avec spins d'Ising : A. $T/J(=1) \ll T_c/J$, B. $T/J(=5) < T_c/J$, C. $T/J(=20) \gg T_c/J$ sur une structure de taille : $N_x = 100a$, $N_y = 100a$, $N_z = 100a$. Les sites de couleur jaune font référence aux spins $\uparrow$, les sites de couleur rouge aux spins $\downarrow$.* 49
3.5 *Dynamique de déplacement d'un électron (en rouge) à travers un réseau de spin (spins "up" en noir, spins "down "en blanc)* 51
3.6 *Schéma de mesure de la résistance d'une boîte de simulation de dimension $N_x \times N_y \times N_z$. La résistance est mesurée comme la somme des électrons (en rouge) traversant les trois parois de comptage (en bleu) par unité de temps.* 52
3.7 *Algorithme Monte Carlo pour le transport de spin* 56
3.8 A gauche : *Schéma d'interaction d'un électron (en rouge) avec les ions du réseau (en noir) à l'intérieur d'une sphère de rayon D_1 centrée autour de l'électron.* A droite : *Schéma d'interaction d'un électron (en rouge) avec les autres électrons (en rouge) à l'intérieur d'une sphère de rayon D_2 centrée autour de l'électron.* 57

4.1 *A-B-C : courbes de résistances en fonction de la température pour les métaux magnétiques purs de gadolinium (A), dysprosium (B), erbium (C). Ces courbes sont tirées de l'article de S. Legvold [59], les insets sont des grossissements réalisés autour de la température critique. D : courbe de résistance d'un semiconducteur magnétique $La_{1-x}Ca_xMnO_3$, tirée de l'article de J. J. Neumeier et al. [86].* 60
4.2 *Maille élémentaire d'un cristal cubique à faces centrées FCC.* 61

4.3 *Aimantation renormalisée du cristal FCC ferromagnétique en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 8a$, $J = 1$. 62
4.4 *Résistance magnétique calculée sans méthode de multimoyennage en unités arbitraires en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8$, $J = 1$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = 1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $E = 1$. 63
4.5 *Résistance magnétique calculée avec la méthode de multimoyennage en unités arbitraires et en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $J = 1$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$. 64
4.6 *Visualisation des surfaces isoénergétique renormalisées (*E_0 *correspond à l'énergie minimum du système) en 3D avec application d'une nappe de couleur représentant l'intensité des énergies ressenties par un électron dans le réseau. La visualisation est extraite d'une exploration d'un bloc de* $N_x \times N_y \times N_z = 4 \times 4 \times 4$ *réalisée à l'intérieur d'une structure de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$ *dans l'état fondamental. Les paramètres utilisés sont* $D_1 = a$, $I_0 = 2$ 65
4.7 *Fonction de distribution radiale* $g(r)$ *calculée à* $T = 0.5$. *Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$. 66
4.8 *Visualisation 3D des clusters de spins down du réseau dans une structure FCC de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 10 \times 10 \times 10a$. à (A) $T = 3$, (B) $T = 9$ . . 67
4.9 *Structure FCC ferromagnétique à* $T \sim T_c$. *Sur cette visualisation les sites jaunes correspondent aux spins up, les spins down aux sites rouges. Les points blancs correspondent aux électrons itinérants polarisés up. On distingue les clusters up (down) du réseau et la localisation des spins itinérants.* 67
4.10 A : *Temps moyen entre deux collisions d'un électron en fonction de la température.* B : *Temps de relaxation du réseau en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$. 69
4.11 *Trajet réalisé par un spin itinérant à travers une structure de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, *avec comme paramètres* $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$. *La figure A correspond au trajet à la température* $T/J = 5$, *la figure B correspond au trajet à* $T_c/J = 9.79$. 70
4.12 *Courbes d'aimantations pour des structures de tailles* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 2a$, $T_c \sim 7.2$ *(ronds noirs), et* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $T_c \sim 9.58$ *(ronds blancs).* 71
4.13 *Résistance en fonction de la température pour différentes valeurs d'interaction électron-réseau* I_0 *:* $I_0 = 2$ *(ronds noirs),* $I_0 = 1$ *(ronds blancs),* $I_0 = 0.5$ *(triangles noirs).* 72
4.14 *Résistance en fonction de la température pour différentes valeurs d'interaction électron-électron* K_0 *:* $K_0 = 0.5$ *(ronds blancs),* $K_0 = 1$ *(ronds noirs),* $K_0 = 1.5$ *(triangles blancs).* 74
4.15 *Mesure de la longueur moyenne renormalisée de sauts des électrons en fonction du rayon de la sphère d'interaction* D_1. 75

4.16 *Isosurfaces d'énergie avec ajout d'une nappe de couleur représentant l'intensité des énergies à l'intéreur d'une maille pour différentes valeurs de* D_1. 76
4.17 A : *Gaz d'électrons homogène,* $D \neq 0$. B : *Collapse des électrons en l'abscence de terme diffusif,* $D = 0$. *Les électrons sont représentés par les points noirs, la boîte de simulation est présentée selon le plan* xz. *Les électrons sont au nombre de* $N_0 = 3200$ *dans une structure de taille équivalente à* $20 \times 20a \times 20a$ *la température est fixée à* $T = 1$. 77
4.18 *Diagramme de phase de collapse des électrons en fonction de* D *et* K_0 *à* $T = 1$. *La zone noire correspond à un domaine de collapse, la zone blanche à une zone homogène.* 78
4.19 A :*Résistance de spins up en fonction de la température.* B : *Résistance de spins down en fonction de la température.* 79
4.20 *Résistances dans le cas de spins polarisés et non-polarisés (ronds noires et blancs respectivement) en fonction de la température. Notons qu'à basses températures les courbes de résistance se superposent parfaitement. La densité de porteurs down est nulle, et les résultats de deux simulations sont identiques.* 80
4.21 *Courbes de résistance d'un réseau BCC ferromagnétique en fonction de la température avec (ronds noirs) et sans (ronds blancs) prise en compte du temps de relaxation* τ_L *du réseau.* 82
4.22 A : *Courbes du temps de relaxation* τ_L *en fonction de la température pour une structure BCC.* B : *Courbes du temps de collision* τ_I *des électrons itinérants en fonction de la température pour une structure BCC.* 83
4.23 *Résistance en fonction de la température pour deux valeurs de la constante* A : $A = 1$ *(ronds noirs) et* $A = 2$ *(ronds blancs).* 84
4.24 *Structure ferromagnétique de dimensions* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8$, *sur laquelle est appliqué un champ électrique* $\vec{E}$ *et un champ magnétique* $\vec{B}$ *le long de l'axe* x. *Les points jaunes représentent les spins up sur les sites du réseau.* 84
4.25 *Courbes de résistance en fonction de la température pour différentes valeurs du champ magnétique :* $B = 0$ *(ronds noirs),* $B = 0.25$ *(ronds blancs),* $B = 0.75$ *(triangles noirs).* 85
4.26 A : *Courbes de résistivité en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétique. Article de Zarand [126].* B : *Courbes de résistivité en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétiques. Article de Kataoka [55].* C : *Courbes de résistances fonction de la température pour différents valeurs de champ magnétiques dans* $P7C3MO$, *courbes tirées de l'article de Zhang et al. [127].* D : *Courbes de résistivité de* $La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO_3$ *(manganite) en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétiques. Courbes tirées de l'article de Souza et al. [107].* 86
4.27 *Courbe d'aimantation des sous-réseaux d'une structure BCC antiferromagnétique en fonction de la température, la température de Néel est observée à* $T_N = 6.35$ 89
4.28 *Clusters de spins up (couleur violette) observés dans des structures BCC de tailles* $N_x \times N_y \times N_z = 10 \times 10 \times 10a$ *à* T_c *pour le cas ferromagnétique (F), et à* T_N *pour le cas antiferromagnétique (AF),* $T_c = T_N = 6.35$. . . . 90

4.29 *Courbes de résistance en fonction de la température pour une structure BCC ferromagnétique (ronds noirs), et antiferromagnétique (ronds blancs).* 91
4.30 *Système BCC antiferromagnétique de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 20a$. *Les points jaunes correspondent aux spins up du réseau, les rouges aux spins down.* 91
4.31 AF : *Différence du nombre moyen de spins up et down* $\Delta N_{\uparrow\downarrow} = N_\uparrow - N_\downarrow$ *interagissant avec l'électron au centre de la sphère de rayon* D_1 *dans un réseau antiferromagnétique à la température* $T = 1$. F : *Différence du nombre moyen de spins up et down* $\Delta N_{\uparrow\downarrow} = N_\uparrow - N_\downarrow$ *interagissant avec l'électron au centre de la sphère de rayon* D_1 *pour un réseau ferromagnétique à la température* $T = 1$. 92
4.32 *Différentes quantités liées au transport en fonction de* D_1 *à la température* $T = 1$ *pour un réseau antiferromagnétique. De haut en bas, nous présentons : la résistance* R, *la vitesse moyenne* v_x *des électrons le long de l'axe* x, *la différence moyenne du nombre de spins up et down en interaction avec un spin itinérant donné* $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ *et l'énergie d'interaction des spins itinérants avec le réseau* E_{e-i}. 93
4.33 *Résistance ferromagnétique (ronds blancs) et antiferromagnétique (ronds noirs) en fonction de* D_1 *à* $T = 1$. 94
4.34 *Variation de l'énergie moyenne d'interaction des électrons avec le réseau ferromagnétique en fonction de* D_1 *à une température* $T = 1$. 94
4.35 *En haut à gauche, visualisation des sous-réseaux occupés par les électrons itinérants en fonction du rayon* D_1. *Pour de faibles rayons* $D_1 = 0.25a$, *les spins occupent le sous-réseau up en haut à gauche, en bas à droite nous représentons les isosurfaces d'énergie dans une boîte de volume* $a \times a \times a$. *Les plans du sous-réseau up correspondent au zones de basses énergies (surfaces bleues). A droite, en haut et en bas, les électrons occupent les plans du sous-réseau de spins down pour* $D_1 = a$, *les isosurfaces d'énergie soulignent que les positions de basses énergies (surfaces bleues) correspondent à ces plans.* 95
4.36 *Courbes de résistance en fonction de la température pour* $D_1 = a$ *(ronds noirs) et* $D_1 = 2a$ *(ronds blancs).* 96
4.37 *Courbes de résistance pour une structure BCC antiferromagnétique avec (ronds noirs), et sans prise en compte du temps de relaxation (ronds blancs).* 97
4.38 A. *Courbes de résistivités fonction de la température pour différentes stœchiométrie du matériau antiferromagnétique* $Cd1{-}xMnxTe$ *[20].* B. *Courbes de résistivités fonction de la température, mesurées par McGuire et al. [73] sur un échantillon de* $LaFeAsO$. C. *Courbes de résistivités fonction de la température, mesurées par McGuire et al. [100] sur un échantillon de* $(1-x)LaMnO_3/(x)SrMnO_3$ *pour différentes stœchiométries.* D. & E. *Respectivement les courbes de résistivités de* $MnTe$ *en fonction de la température, tirées des l'articles de He et al. [47] et de Efrem et al. [30].* 100

5.1 *Structure de type* $NiAs$ *du semiconducteur* $MnTe$. *Les cercles bleus correspondent aux sites occupés par le tellurium* Te *non-magnétique, les cercles noirs et blancs aux sites occupés par les ions de manganèse* Mn, *respectivement de spins up et down. Les premiers voisins interagissent par l'intégrale d'échange* J_1, *les seconds voisins par* J_2 *et les troisièmes voisins par* J_3. . 102

5.2 *Résistivités en unitées arbitraires en fonction de la température pour le matériau $MnTe$. La courbe portant des ronds blancs correspond à la résistivité théorique dans le cas du semiconducteur non-dégénéré. La courbe portant des étoiles correspond aux résultats expérimentaux mesurés par Chandra et al. [20].* 104
5.3 A. *Variation du moment magnétique moyen des ions Mn en fonction de la température. Cette courbe est issue de l'article de Efrem et al. [30].* B. *Variation du moment magnétique moyen des ions Mn calculé par simulation Monte Carlo.* 107
5.4 *Résistivité en fonction de la température pour une structure $MnTe$ pure. Les points noirs correspondnt aux résultats expérimentaux de He et al. [47], et les points blancs à nos résultats de simulation Monte Carlo.* 109
5.5 *Visualisation 3D des spins du réseau en rouge, et des spins itinérants en bleu à la température de Néel T_N. On constate comme pour le cas des interactions d'Ising une localisation des spins itinérants sur le réseau de spins de Heisenberg.* 109

6.1 *Maille d'un réseau triangulaire dont chaque site est occupé par un spin en interaction antiferromagnétique avec ses plus proches voisins.* 112
6.2 *Etats fondamentaux d'une structure FCC antiferromagnétique. Les configurations (1) & (3) correpondent à des constantes de couplage fixées tel que : $|J_s| < 0.5|J_c|$. La configuration (2) à $|J_s| > 0.5|J_c|$. Les plans rouges représentent le sous réseau ferromagnétique.* 113
6.3 *Aimantation renormalisée de la structure antiferromagnétique FCC pour une épaisseur $N_z = 8a$. La température de transition est observée à $T_N = 1.79$.* 114
6.4 *Variation de différentes grandeurs physiques en fonction de D_1 (en unité du paramètre de maille a) dans le cas dégénéré (1). Les points noirs correspondent à l'évolution des grandeurs à $T_N^- = 1.65$, les losanges blancs à $T_N^+ = 2$. De haut en bas : Résistance R, composante moyenne v_x des vitesses sur x , différence entre le nombre de spins up et down $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ moyennée dans la sphère d'interaction D_1 , énergie moyenne d'interaction E_{e-i} entre un spin itinérant et les spins voisins du réseau dans la sphère d'interaction D_1.* 115
6.5 *Résistance d'un film mince de taille $N_x = N_y = 20a$ et $N_z = 8a$ pour $N_0 = 1600$ électrons itinérants en fonction de la température dans l'état dégénéré (1). Les points noirs (A) ont été réalisés avec un rayon $D_1 = a$, les points blancs (B) avec un rayon $D_1 = 1.25a$. Les autres paramètres ont été fixés tel que : $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.* 116
6.6 *Représentation d'un réseau cubique simple. Les spins up correspondent aux sites blancs, les spins down aux cercles noirs. Les constantes de couplages J_1 et J_2 correspondent respectivement aux interactions premiers et seconds voisins. L'état dégénéré (1) correspond à $|J_2| < 0.25|J_1|$. L'état dégénéré (2) correspond à $|J_2| > 0.25|J_1|$.* 118
6.7 *Résistances magnétiques mesurées par simulation Monte Carlo pour $D_1 = 0.7a$ (points noirs), et $D_1 = 1.2a$ (points blancs) [49].* 118

6.8 *Variation de différentes grandeurs physiques en fonction de D_1 dans le cas dégénéré (3). Les points noirs correspondent à l'évolution des grandeurs à $T_N^- = 1.65$, les losanges blancs à $T_N^+ = 2$. De haut en bas : Résistance R, composante moyenne v_x des vitesses le long de l'axe x, différence $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ entre le nombre de spins up et down moyennée dans la sphère d'interaction D_1, énergie moyenne d'interaction E_{e-i} entre un spins itinérant et les spins voisins du réseau dans la sphère d'interaction.* 119
6.9 *Résistance d'un film mince de taille $N_x = N_y = 20a$ et $N_z = 8a$ pour $N_0 = 1600$ électrons itinérants en fonction de la température dans l'état dégénéré (3). La courbe noire a été réalisée avec un rayon $D_1 = a$, la courbe blanche avec un rayon $D_1 = 1.25a$. Les autres paramètres ont été fixés tel que : $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.* 120
6.10 *Isosurfaces des maximums (surfaces rouges) et des minimums (surfaces bleues) d'énergies dans une maille $a \times a \times a$ à $T = 1$ pour les cas (1) et (3) (respectivement gauche et droite).* 121
6.11 *Trajectoire d'un spin itinérant à $T = 1.65$ dans le premier état dégénéré du réseau (en haut), et dans le second état dégénéré (en bas). Les simulations pour les deux états ont été réalisées pour le même temps de transport et la même valeur de D_1. Les autres paramètres sont les suivants : $N_0 = 1600$, $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.* 122
6.12 *Résistance en fonction de la température dans le premier état dégénéré (ronds blancs) et dans le second état dégénéré (ronds noirs). Les paramètres sont les suivants : $D_1 = a$, $N_z = 8$, $N_0 = 1600$, $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.* 123
6.13 *Courbes d'aimantation des plans de surfaces (001), et de volume en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont les suivants : $D_1 = a$, $N_z = 8a$, $J_s = -0.5$,$J_c = -1$. La transition magnétique des plans de surfaces prennent place à $T_1 = 1.2$, la transition de volume à $T_2 = 1.79$.* 123
6.14 *Résistance en fonction de la température pour : $D_1 = a$, $N_z = 8$, $N_0 = 1600$, $J_s = -0.5$, $J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$. Nous remarquons deux anomalies liées aux deux transitions du réseau : transition des surfaces à $T_1 = 1.2$ et transition de voulme à $T_2 = 1.79$.* 124
6.15 *Résistance, vitesse et énergie des spins itinérants en fonction de D_1. Chaque grandeur est tracée pour deux températures, $T_N^- = 0.75$ (ronds noirs) et $T_N^+ = 0.85$ (losanges blancs). Le premier jeu de courbes correspond à l'état dégénéré (1), le second à l'état dégénéré (3).* 125
6.16 *Résistance en fonction de la température pour le modèle de Heisenberg. Pour chaque courbe, nous traçons les résistances pour $D_1 = a$ (ronds noirs) et $D_1 = 1.25a$ (ronds blancs). Le premier jeu de courbes correspond à l'état dégénéré (1), le second à l'état dégénéré (3).* 126
6.17 *Courbes de résistivités dans un système antiferromagnétique dopé (manganite $(La_{1-z}Nd_z)_{0.46}Sr_{0.54}MnO_3$) présentant deux types de transition fonction de la stœchiométrie z. Courbes tirées de l'article de Akimoto et al. [2].* 128

7.1 *A gauche : représentation de la densité d'états pour un métal 3d non-magnétique. A droite : représentation de la densité d'états pour un ferromagnétique 3d.* 132

7.2 *Dynamique des deux courants de spins "up & down" dans un système bi-couches magnétiques parallèle/antiparallèle séparées par une couche non-magnétique.* 133
7.3 *Structure GMR en configuration CPP. La structure est constituée de deux couches ferromagnétiques $i = 1$ et $i = 3$, séparées par un espaceur ferromagnétique antiparallèle $i = 2$, de largeur d. La taille du dispositif en unité de paramètre de maille a est de $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$. Les sites de couleur jaune correspondent aux spins "up" (parallèles à l'axe x), les sites de couleur rouge aux spins "down" (antiparallèles à x). Des champs électrique et magnétique sont appliqués le long de l'axe x.* 134
7.4 *A gauche : courbes d'aimantation du réseau en fonction de la température pour deux largeurs de l'espaceur antiparallèle $i = 2$. A droite : courbe de susceptibilité magnétique en fonction de la température. Ces résultats sont issus d'une simulation sur une structure BCC de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$* 136
7.5 *Courbes d'aimantation du réseau versus T pour deux épaisseurs $N_z = 8a$ en noir, et $N_z = 40a$ en blanc.* 136
7.6 *Courbes d'aimantation du réseau pour différentes valeurs de champs magnétique B_x, obtenues à partir de structure de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$ avec un espaceur antiparallèle $d = 3a$. Les triangles noirs correspondent à un champ magnétique $B_x = 0$, les points blancs à $B_x = 0.5$, les points noirs à $B_x = 1$.* 137
7.7 *A gauche, carte de densité des spins itinérants Δ, le long de l'axe x et en fonction du temps. A droite, structures CPP 3D au temps $t = 0$ (en haut), et $t = 200$ (en bas). Les points jaunes et rouges correspondent respectivement aux spins "up" et "down" du réseau. Les points blancs, aux spins itinérants polarisés "up".* 138
7.8 *De gauche à droite, cartes de densités de spins itinérants polarisés "up" Δ le long de l'axe x, en fonction de la température. Les cartes correspondent aux valeurs de champs magnétique : $B_x = 0$, $B_x = 0.5$, $B_x = 1$.* 139
7.9 *De gauche à droite, cartes de densités de spins itinérants non-polarisés Δ le long de l'axe x, en fonction de la température. Les cartes correspondent aux valeurs de champs magnétique : $B_x = 0$, $B_x = 0.5$, $B_x = 1$.* 140
7.10 *Courbes des vitesses moyennes des électrons le long de l'axe x en fonction de la température, à champ magnétique nul. Les points noirs correspondent à la population de spins "up", les points blancs à la population de spins "down".* 141
7.11 *Courbes des résistances en fonction de la température, à champ magnétique nul. Les points noirs correspondent à la résistance de la population de spins "up", les points blancs à la résistance de la population de spins "down".* . . 141
7.12 *Courbes des vitesses moyennes des électrons le long de l'axe x en fonction de la température, pour trois valeurs de champ magnétique : $B_x = 0$ (points), $B_x = 0.5$ (carrés), $B_x = 1$ (triangles). Les courbes noires correspondent à la population de spins "up", les courbes blanches à la population de spins "down".* 142

7.13 *Courbes de résistance en fonction de la température, pour trois valeurs de champ magnétique : $B_x = 0$ (points), $B_x = 0.5$ (carrés), $B_x = 1$ (triangles). Les courbes noires correspondent aux résistances de spins "up", les courbes blanches aux résistances de spins "down".* 142
7.14 *Courbes de résistance magnétique en fonction de la température pour le cas de spins itinérants non-polarisés (points noirs), et de spins polarisés (points blancs).* 143

Liste des tableaux

1.1 Conductivités de plusieurs métaux 9

3.1 Températures de Debye pour quelques métaux 41
3.2 Températures de transitions renormalisées fonction du type de réseau cristallin et de la dimension des structures 42

5.1 Valeurs des constantes de couplage pour $MnTe$ 102
5.2 Liste des paramètres de simulations pour $MnTe$ 106

Remerciements

La thèse n'était pas une fin en soi, mais un besoin nécessaire à une période où l'ennuie avait pris le dessus sur mes anciennes fonctions d'ingénieur. Le bilan de ces trois années est extrêmement positif, trois années qui ont filé en un éclair, et pendant lesquelles les travaux effectués n'ont été que jeu et plaisir. Aussi, je tiens à adresser de profonds remerciements à trois personnes en particulier, mon directeur de thèse, Hung The Diep, qui par ses qualités humaines et ses compétences scientifiques a su rendre chaque journée au labo aussi agréable qu'instructive. Laura Hernandez, qui faute d'avoir eu la chance immense de m'avoir comme thèsard [1], m'a permis de faire celle dont j'écris en ce moment même les remerciements. Enfin, à mon ancien professeur et ami Jean-Luc Rimbault, qui m'a transmis cette intérêt pour la physique statistique et la recherche.

Un grand remerciement à ma famille de m'avoir épaulé et écouté pendant des heures m'énerver après des pauvres spins qui ne faisaient pas toujours ce que je voulais... A Héloïse Nonne, Ghali Filali et Danh-Taï Hoang pour l'émulation scientifique, et les douces soirées passées en leur compagnie. A mes très chères Laura Thévenard et Eszter Kovàts pour leur relecture du manuscrit, à Céline Bailly, qui bien que non-scientifique en connaît long sur le sujet.

Pour finir cette brève séquence émotion, je tiens à adresser mes salutations et amitiés à l'ensemble du LPTM, Guy, Damien, Phillipe, Truong, Alexandre, Cédric, Geneviève et tous les autres, qui nous ont acceuillis et guidés, nous fournées de thèsards LPTM 2008 avec beaucoup de gentillesse et de patience. Merci à vous.

1. C'est du second degré!!!

Résumé

DEPUIS le début du XX siècle, la thématique de transport a concentré l'attention de nombreux chercheurs. L'objectif étant alors d'identifier et de comprendre les différentes sources de diffusions prenant part à la résistivité de la matière. Les deux premières sources diffusives mises en évidence ont été les phonons dépendant de la température, et les défauts du réseau cristallin. Dans les années 1950, l'étude des semiconducteurs a fait émerger une troisième source de diffusion, la diffusion magnétique. Dès la mise en évidence du rôle joué par le magnétisme sur la résistivité de certains matériaux, il a rapidement été établi que la résistivité magnétique R est tributaire de la stabilité de l'ordre magnétique du réseau. A basse température T, la diffusion des électrons s'opère par le biais des ondes de spins. A haute température, R est proportionnelle aux corrélations spin-spin. Cependant, les mécanismes de diffusion ayant lieu au voisinage de la température de transition ordre/désordre magnétique restent encore mal comprise. L'objectif de cette thèse a consisté à étudier ce problème à l'aide d'une approche nouvelle basée sur la simulation Monte Carlo. En effet, les théories existantes sont toutes construites avec des hypothèses sur les mécanismes à l'origine du comportement de résistance tels que : fonction corrélation spin-spin, longueur de localisation. Elles utilisent beaucoup d'approximations au cours du calcul telles que théorie du champ moyen, approximation du temps de relaxation, la portée des fonctions de corrélation. Les principaux handicaps de ces théories sont de n'être valables que pour certaines gammes de températures, et d'être tributaires du type de magnétisme porté par les réseaux cristallins. Notre approche offre quant à elle une procédure unifiée concernant l'étude des résistivités magnétiques fonction de la température. Cette méthode peut s'appliquer à tout type de matériaux, tout ordre magnétique (ferromagnétique, antiferromagnétique, ferrimagnétique, verre de spin, ...), tout type de modèle de spins (Ising, Heisenberg, XY, ...), enfin tout type de réseau cristallin. Seule la connaissance du Hamiltonien permet de faire la simulation, et de reproduire des mesures expérimentales avec la possibilité d'une comparaison quantitative.

Dans un premier temps, nous traitons de structures ferromagnétiques [67] et interprétons les différents mécanismes de diffusion en fonction de la température. Nous étendons ensuite létude aux systèmes antiferromagnétiques, frustrés et non-frustrés. Ces systèmes n'ont fait l'objet que de peu d'études. Dans le cas des systèmes antiferromagnétiques non-frustrés, nous sommes en mesure de contredire une prédiction théorique faite par Haas en 1968, concernant la forme de la résistance magnétique à la transition de phase [68]. Dès lors, nous nous consacrerons à l'étude des mécanismes de transport dans des systèmes antiferromagnétiques frustrés. Ces travaux ont permis de mettre en évidence des comportements nouveaux des transitions de phases des résistances magnétiques : nous montrons que ces résistances subissent une transition du premier ordre [50], mais qu'il est également possible par le contrôle d'un paramètre du modèle, de choisir le sens de la transition : des hautes résistances vers les basses résistances ou inversement [66].
Pour finir, nous confrontons nos résultats de simulations avec des mesures expérimentales en réalisant une étude de transport sur un matériau semiconducteur antiferromagnétique : MnTe. Il résulte de cette étude un bon accord entre nos résultats de simulations et les mesures expérimentales [1].

Introduction

Dès la mise en évidence de l'existence de l'électron par J. J. Thomson, la question de savoir **"comment les électrons se propagent à travers la matière"** va cristalliser l'attention de la communauté scientifique. P. Drude en 1905 est le premier à formuler, à travers la constante du temps de relaxation, une théorie capable d'expliquer une partie des résultats expérimentaux sans pour autant révéler l'origine de la diffusion des porteurs dans la matière. Plusieurs décennies de recherche permettent d'élaborer de multiples théories ayant pour but de révéler les mécanismes de diffusion électronique, et de rendre compte des comportements des résistances électriques des matériaux conducteurs.
Une première origine au comportement de la résistance est due aux phonons qui sont des excitations collectives des atomes du réseau cristallin. Les phonons sont dominants à haute température, et représentent une source de diffusion électronique. La seconde source identifiée aura pour origine les imperfections du réseau, ce que l'on appelle les défauts cristallins, qui ont une contribution dominante à très basse température : impuretés, lacunes, dislocations, joints de grains, etc... On présente en figure 1 des courbes de résistance pour plusieurs échantillons de cuivre, or, aluminium, etc... en fonction de la température. On note sur ces courbes deux régimes caractéristiques de résistance liés aux phonons. La résistance suit une loi en $R \propto T^5$ au-desssous de la température de Debye Θ_D (température au-dessous de laquelle tous les modes de phonons ne sont pas activés), et $R \propto T$ au-dessus de Θ_D.

Les théories concernant l'évolution de la résistance en fonction de la température induite par les phonons et les impuretés expliquent bien les comportements observés expérimentallement dans les solides conducteurs non-magnétiques. Les conducteurs magnétiques présentent également une résistance dépendante des phonons et des impuretés, elle est cependant dominée par une troisième source de diffusion d'origine magnétique surtout autour d'une température dite "critique" T_c marquant la transition entre les configurations magnétiques ordonnées du réseau (ferromagnétique, antiferromagnétique, ferrimagnétique, etc...) à $T < T_c$, et désordonnées (paramagnétiques) à $T > T_c$. Par analogie avec les phonons, le désordre spatial introduit par l'énergie thermique dans le réseau, se traduit pour le magnétisme par le désordre des moments magnétiques (ou à un facteur près "les spins"), qui occupent les sites du réseau cristallin. De la même manière, des impuretés magnétiques peuvent être présentes dans le réseau et contribuer à la diffusion des porteurs.
Un exemple très connu sur les effets des impuretés magnétiques est l'effet Kondo : dans les métaux, le spin de l'impureté attire un spin d'un électron de conduction pour former une paire antiferromagnétique. Le couplage de cette paire, faible à haute température, est très forte à très basse température. Ce fort couplage induit une divergence de la résistivité lorsque $T \to 0$ selon la formule $\rho_{Kondo}(T) = C \ln\left(\frac{\mu}{T}\right)$, où C et μ sont des constantes.

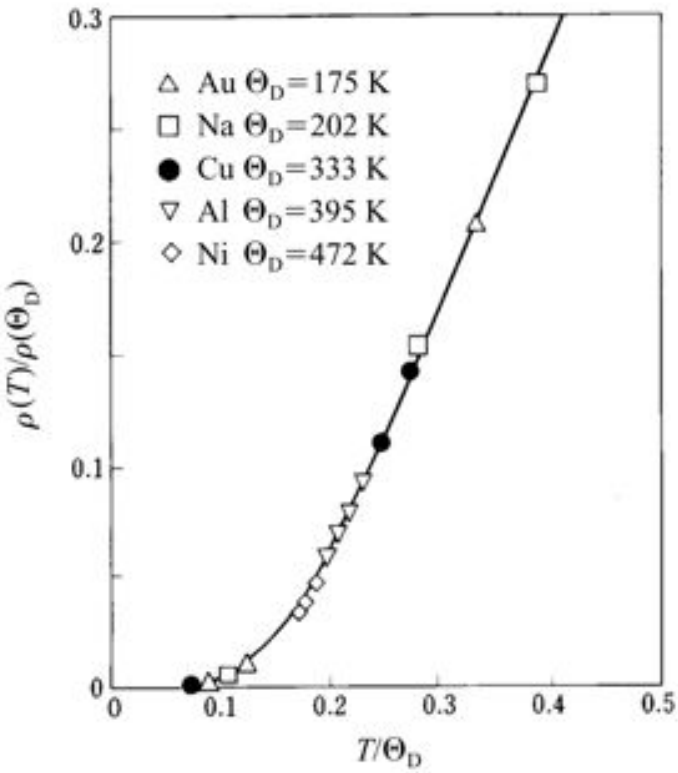

FIGURE 1 – *Courbes de résistivités normalisées par la résistivité à la température de Debye pour différents échantillons métalliques, en fonction de la température normalisée par la température de Debye. Courbe tirée du livre de Mizutani et al. [79].*

Les comportements des résistances des matériaux magnétiques sont bien plus complexes, et présentent plusieurs comportements différents d'un matériau à un autre, comme on le verra avec les métaux magnétiques, les semiconducteurs magnétiques, les semiconducteurs dilués, etc... Ces matériaux peuvent présenter un ordre ferromagnétique, antiferromagnétique, ferrimagnétique ou encore un désordre gelé magnétique comme c'est le cas des verres de spins par exemple.
A trés basse température, la résistance due à la diffusion des électrons par les ondes de spin suivent une loi en T^2 dans les matériaux ferromagnétiques (notons que dans un liquide de Fermi la résistance suit également une loi en T^2). A plus haute température le comportement de la résistance reste une question ouverte. Par exmeple, les semiconducteurs magnétiques présentent dans la très grande majorité des cas un pic de résistance à la température de transition (cf. figure 2.D). Un autre exemple concerne les métaux magnétiques qui peuvent présenter deux types de comportements, avec ou sans pic à T_c (cf. figures 2.A,B,C). Dans le cas des métaux magnétiques ne présentant pas de pic, on caractérise souvent l'évolution de résistance par sa dérivée par rapport à la température, qui elle présente un pic à T_c. Les semiconducteurs dilués présentent quant à eux un pic infini de résistance à T_c. Face à cette diversité de comportements de résistance, de nombreuses théories ont tenté de caractériser ces formes de résistance ainsi que les mécanismes de diffusion induits par le magnétisme de ces structures. Comme nous allons le constater, **il n'existe pas de théorie capable de traîter l'ensemble des systèmes étudiés**

expérimentalement, chaque théorie suppose un mécanisme à priori pour expliquer le comportement de résistance d'un matériau donné. Cependant chaque mécanisme supposé requiert l'utilisation d'une méthode théorique et des approximations appropriées. Autrement dit, chaque théorie traîte un cas particulier de matériau. Les principaux handicaps de ces théories sont donc de n'être applicables que sur une petite gamme de températures (les ondes de spin par exemple), pour une structure cristalline et un type matériau donné. Ces approximations sont susceptibles de conduire à des prédiction erronées. **Nous étudions pour notre part le problème par une approche numérique basée sur la simulation Monte Carlo**. Pour appliquer cette méthode, il faut définir un Hamiltoninen, somme des interactions entre les différents objets du système (atomes et électrons de conduction). A l'aide d'une dynamique stochastique qui nous permet de ne rien supposer du comportement de la résistance préalablement au calcul. Avec le Hamiltonien défini, le système évolue par lui-même au cours de la simulation. Cette démarche nous a permis d'observer des formes de résistance en bon accord avec les expérimentations, et d'extraire des simulations les mécanismes de diffusion sur une large gamme de températures. Avant de faire état d'une synthèse succincte des différentes théories construites depuis la moitié du XX siècle, mentionnons que l'étude des semiconducteurs est de nos jour plus ou moins délaissée au profit des systèmes dilués, ou de systèmes artificiels, par exemple les multicouches magnétiques. Nous ne traiterons pas des systèmes dilués dans un premier temps, car nous souhaitons dans le cadre de ce travail élaborer un modèle numérique pérein, qui sera ultérieurement capable de prendre en compte les métaux magnétiques et les systèmes dilués. **Dans le cadre de ce document, nos simulations ne traiteront uniquement que de semiconducteurs déjà largement caractérisés expérimentalement.**

Les premières théories visant à comprendre l'origine de "l'anomalie" de résistance datent des années 1950. Les premiers travaux se concentrent sur les métaux magnétiques. Assez rapidement Kasuya [53][54] identifie que l'ordre magnétique du réseau et la résistance d'un métal magnétique sont reliés par l'intermédiaire des interactions qu'entretiennent les spins des porteurs avec les spins des ions du réseau. Mais la théorie qui va initier toutes les autres, est donnée par De Gennes et Friedel [24]. Afin de relier l'ordre magnétique du réseau à la diffusion des porteurs, les auteurs vont utiliser la fonction de corrélation des spins du réseau comme probabilité de diffusion. Cette idée hélas ne permet pas de rendre compte de l'ensemble des comportements des résistances magnétiques observées expérimentalement, et même ne s'applique pas aux métaux magnétiques, ni aux matériaux antiferromagnétiques. Nonobstant l'idée de De Gennes et Friedel va permettre de rendre compte d'un certain nombre de mécanismes, et d'ouvrir la voie aux théories qui suivront.

Si depuis les années 1950 des zones d'ombre subsistent encore dans la compréhension des mécanismes de transport à l'origine de l'apparition (ou non) d'un pic de résistance, les recherches menées sur les matériaux magnétiques ont malgré tout permis d'en tirer un large parti, et d'aboutir à la mise en œuvre de dispositifs de mesures, de stockages de l'information, ou encore l'avènement de l'informatique grand publique. En effet, il y a une vingtaine d'années, à une période dans laquelle la thématique de transport était en perte de vitesse, A. Fert et al. [36] et P. Grunberg [45], menèrent des travaux sur des structures magnétiques artificielles. Les résultats de leurs recherches débouchèrent sur la découverte de la magnéto-résistance géante (GMR). Motivée par les applications industrielles [12], la problématique de transport de spin revient dans le champ de recherche comme l'une des thématiques du moment [108][10][44][81][75][19].

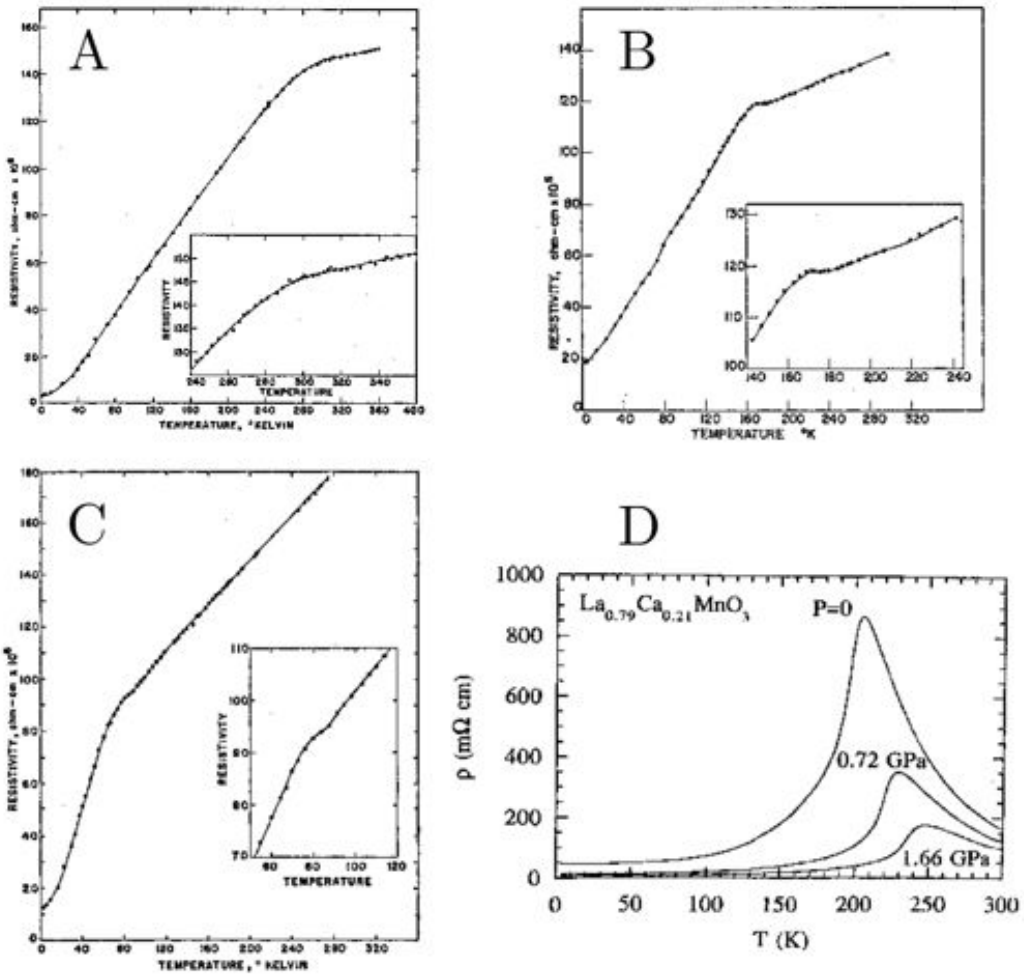

FIGURE 2 – *A-B-C : courbes de résistances en fonction de la température pour les métaux magnétiques purs de gadolinium (A), dysprosium (B), erbium (C). Ces courbes sont tirées de l'article de S. Legvold [59], les insets sont des grocissements réalisés autour de la température critique. D : courbe de résistance d'un semiconducteur magnétique* $La_{1-x}Ca_xMnO_3$*, tirée de l'article de J. J. Neumeier et al. [86].*

Il est nécessaire aujourd'hui afin d'optimiser les dispositifs existants de réaliser une étude rigoureuse du transport électronique dans des structures magnétiques en multicouches, et cette étude requiert au préalable une vision claire des mécanismes de diffusion électronique inhérente aux différents comportements de résistivité dans les différents matériaux magnétiques, notamment les semiconducteurs, largement utilisés dans la conception de ces dispositifs. Face aux difficultés théoriques auxquels se heurtent actuellement les recherches sur le sujet, l'utilisation des méthodes numériques devient tout-à-fait pertinente afin d'étendre notre connaissance sur le sujet. Parmi les méthodes les plus performantes figurent celles de Monte Carlo qui permettent une étude des propriétés de transport dans une diversité de situation [5][82][89][114][128]. Les systèmes hors équilibre très répandus en transport sont particulièrement difficiles à simuler et doivent être pris au cas par cas. On entend par systèmes hors équilibre les systèmes non isolés, dont l'évolution vers l'équilibre est empêchée, les systèmes régis par un temps de relaxation très long par

rapport au temps microscopique, et l'ensemble des systèmes soumis à des phénomènes irréversibles.
Contrairement à la physique statistique à l'équilibre dans laquelle la distribution de Gibbs-Boltzmann permet de caractériser la distribution des états, il n'existe pas de méthode générale pour construire la distribution des états d'un système hors équilibre en régime stationnaire. Pour cette raison, des méthodes d'exclusions ont vu le jour, et permettent de modéliser un grand nombre de problèmes (trafic routier, finance, etc...). En acceptant de mettre de côté le principe de bilan détaillé, trop contraignant dans les systèmes hors équilibre, plusieurs auteurs font appel aux méthodes Monte Carlo standard. C'est par exemple la démarche empruntée par Zakheim et al. [125] sur le transport électronique et l'effet du champ dans les nanostructures métalliques granulaires, ou encore celle de Yang Gon Seo et al. [103] sur le transport diffusif dans les membranes de carbone nanoporeuses par le biais de simulations Monte Carlo Métroplis.

Ce manuscrit est structuré de la façon suivante. Dans le chapitre 1 nous présentons les différentes approches théoriques liées au transport, modèles classique et semi-classique, et leurs limitations respectives jusqu'à l'introduction de l'équation de Boltzmann. Le chapitre 2 est consacré aux différentes idées qui ont permis l'élaboration de théories visant à interpréter les causes de l'anomalie de résistance magnétique dans les matériaux magnétiques. Dans ce chapitre nous réaliserons également une synthèse des différents comportements de résistance observés expérimentalement dans les métaux (métaux de transitions et terres rares), ainsi que dans les semiconducteurs. Le chapitre 3 est consacré à la description de notre modèle de calcul. Nous décrirons l'ensemble des interactions dont nous tenons compte lors de nos simulations Monte Carlo, de la dynamique artificielle que suivent les spins itinérants lors d'une simulation, et de l'ensemble des procédures de moyennes réalisées. Le chapitre 4 sera consacré en grande partie à l'interprétation des différents comportements de la résistance en fonction des conditions initiales de simulation. Nous décrirons la dynamique des porteurs pour différentes gammes de températures, ainsi que les différents mécanismes de diffusion dans les structures magnétiques, pour différentes épaisseurs, avec ou sans champ magnétique. Ce chapitre sera divisé en deux parties : la première sera consacrée au transport dans les systèmes ferromagnétiques, la seconde dans les systèmes antiferromagnétiques. Dans le chapitre suivant 5, nous introduirons des unités à notre modèle pour un cas concret. En effet une grande partie du document repose sur des résultats issus d'un modèle fonction d'interactions adimensionnées. Nous avons jugé utile d'introduire pour un semiconducteur composé de manganèse et de tellurium $MnTe$ les données expérimentales dans le modèle pour deux raisons, la première de réaliser une étude ayant pour but la comparaison directe des résultats expérimentaux avec nos résultats de simulation, et la deuxième de nous permettre de justifier, par le calcul de différentes grandeurs physiques, l'approche classique autour de laquelle est construit notre modèle. Nous verrons un bon accord entre expérimentations et simulations. Nous poursuivrons notre étude du transport dans des systèmes antiferromagnétiques frustrés, dans lesquels les comportements de résistances sont tout à fait surprenants, chapitre 6. Enfin, la dernière partie, chapitre 7, sera consacrée au transport dans des structures en multicouches en configuration perpendiculaire (CPP).

Chapitre

1 Introduction à la résistance électrique des matériaux

1.1 La théorie de Drude appliquée aux métaux

En 1900, Paul Drude motivé par la découverte de l'électron faite trois années plus tôt par Joseph John Thomson, focalise ses recherches sur la propagation de ces nouvelles "particules" dans les métaux. Il s'inspire et adapte la théorie cinétique des gaz, en considérant des porteurs de charges négatives (électrons) comme un gaz de sphères dures classiques, auxquels on peut appliquer la théorie cinétique. En l'absence de champs, ces particules se déplacent de façon isotrope à travers un réseau de charges positives, massives et immobiles. Enfin, les électrons interagissent avec le réseau par une succession de collisions inélastiques sur les ions qui le composent.

Les hypothèses faites par Drude sont les suivantes :

- Entre deux collisions, l'interaction d'un électron avec les autres électrons, ainsi qu'avec les ions est nulle. En l'absence de champ extérieur, les électrons ont un mouvement rectiligne uniforme et isotrope. En présence d'un champ extérieur, le mouvement des électrons entre les collisions est déterminé par les équations de Newton.
  Le fait de négliger les interactions électron-électron entre chaque collisions (approximation des électrons indépendants) est bon dans de nombreux cas. Cependant, le fait de négliger l'interaction électron-ion (approximation des électrons libres) devra être abandonné si l'on veut expliquer les différents comportements de diffusions des porteurs de charges d'un métal à un semiconducteur.

- Les collisions sont des événements instantannés qui ont lieu sur des particules ponctuelles ayant pour effet de modifier brusquement la vitesse des électrons. Cette hypothèse revient à négliger les forces à longue portée entre les électrons et le réseau.

Bien que ce modèle comporte de nombreuses limitations théoriques, il a l'avantage en première approximation de pouvoir être traîté sans connaissance particulière des mécanismes de collisions. L'idée de Drude pour formaliser son modèle est de définir une grandeur caractéristique qui lui permettra d'établir une expression théorique de la conductivité. Cette grandeur, c'est le temps de relaxation de l'électron, c'est-à-dire le temps séparant deux collisions successives d'un électron avec les ions du réseau. Ainsi, la probabilité qu'un électron subisse une collision durant un intervalle de temps compris entre t_0 et $t_0 + dt$ est définie par dt/τ. Cette probabilité est indépendante de t_0, de la position et de la vitesse

de l'électron. La vitesse est reliée à la température locale (de la région de l'espace où la collision a eu lieu).

A partir de la loi de Ohm et de l'expression du courant [33] :

$$\vec{j} = \sigma\vec{E} = ne < \vec{v} > \quad \text{soit} \quad \sigma = \frac{ne < v >}{E} \tag{1.1}$$

avec j la densité de courant, σ la conductivité électrique, n la densité de porteurs, e la charge de l'électron, enfin $< \vec{v} >$ la vitesse moyenne des électrons dans la direction du champ électrique $\vec{E}$. Quand E est nul, la distribution de vitesse des électrons est isotrope, ainsi $< \vec{v} >= 0$. En présence d'un champ électrique $\vec{E}$, les électrons sont uniformément accélérés entre deux collisions par le biais de la force de Lorentz $\vec{F} = -e(\vec{E}+\vec{v}\times\vec{B})$, avec $\vec{B}$ le champ magnétique appliqué. Les collisions avec le réseau auront pour conséquence de ralentir les électrons, et sera introduite dans le calcul sous la forme d'une force de frottement visqueux : $-\frac{\vec{v}}{\tau}$. A tout instant, chaque électron a donc une vitesse $\vec{v}$ qui s'écrit :

$$\vec{v}(t,\vec{r}) = \vec{v}_0 + \left(\frac{-e\vec{E}t}{m_e}\right) \tag{1.2}$$

où $\vec{v}_0$ est la vitesse initiale de l'électron à la suite d'une collision, t le temps écoulé depuis le dernier choc et m_e la masse d'un électron. La vitesse moyenne est alors donnée par :

$$\langle\vec{v}\rangle = \langle\vec{v}_0\rangle + \left\langle\frac{-e\vec{E}t}{m_e}\right\rangle \tag{1.3}$$

Comme $\langle\vec{v}_0\rangle = 0$ et $\langle t\rangle = \tau$, on obtient que $\langle\vec{v}\rangle = \frac{-e\vec{E}\tau}{m_e}$, on déduit ainsi l'expression du courant électrique et de la conductivité :

$$\vec{j} = -ne\langle\vec{v}\rangle = \frac{ne^2\vec{E}\tau}{m_e} \tag{1.4}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \tag{1.5}$$

Nous donnons dans le tableau 1.1 des grandeurs caractéristiques de la conductivité de plusieurs métaux [33] :

1.1.1 Limitations classique/quantique de la théorie de Drude

Nous avons fait remarquer que la théorie de Drude repose sur plusieurs hypothèses, aussi, concentrons-nous sur les limitations de cette théorie. Un exemple concret peut en être donné lorsque l'on tente d'expliquer la magnétorésistance par le modèle de Drude. En 1879, Hall cherche à comprendre l'altération de la résistivité des métaux soumis à un champ magnétique. Son expérience consiste à appliquer un champ électrique E_x le long

TABLE 1.1 – Conductivités de plusieurs métaux

Métal	σ $[10^7\Omega^{-1}m^{-1}]$
Na	2.34
Cu	6.45
Ag	6.6
Be	3.6
Mg	2.54
Al	4.0
Pb	0.52
Bi	0.093
Pt	1.02

de l'axe x d'un échantillon, ainsi qu'un champ magnétique B_z, le long de l'axe z. Les composantes du courant ont alors pour expressions :

$$\sigma|\vec{E}_x| = \frac{e|\vec{B}_z|\tau|\vec{j}_y|}{m_e} + |\vec{j}_x| \tag{1.6}$$

$$\sigma|\vec{E}_y| = -\frac{e|\vec{B}_z|\tau|\vec{j}_x|}{m_e} + |\vec{j}_y| \tag{1.7}$$

L'application d'un champ magnétique dans l'expérience de Hall, implique un régime transitoire pendant lequel l'effet du champ magnétique va induire un courant $\vec{j}_y$, qui disparait à mesure que s'établit un champ électrique $\vec{E}_y$. Dans le régime stationnaire, $|\vec{j}_y| = 0$. Nous définissons la magnétorésistance tel que :

$$\rho(B) = \frac{1}{\sigma} = \frac{|\vec{E}_x|}{|\vec{j}_x|} \tag{1.8}$$

Cette dernière expression indique que la magnétorésistance ne dépend pas du champ magnétique $\vec{B}_z$, ce qui est en désaccord avec la réalité expérimentale. La seconde expression rend compte de la constante de Hall, qui ne dépend que de la densité d'électrons.

$$R_H = \frac{|\vec{E}_y|}{\vec{j}_x \times \vec{B}_z} = -\frac{1}{ne} \tag{1.9}$$

Validité de l'approche classique de Drude

L'approximation qui consiste à appliquer un traitement classique à un problème, n'est valable que si la constante fondamentale $\hbar$, caractéristique de la mécanique quantique, est négligeable devant les grandeurs physiques de mêmes dimensions associées au système. Le traitement d'un système par le biais de la physique classique est soumis au respect du principe d'incertitude de Heisenberg, à savoir :

$$\delta r \delta p_r \ll \hbar \tag{1.10}$$

Ainsi, si les incertitudes de positions et d'impulsions vérifient Eq. 1.10, la largeur de la fonction d'onde est inappréciable à l'échelle du problème et suit les lois de la mécanique classique. On peut rendre compte de cette limite en utilisant la longueur d'onde de de

Broglie, Eq. 1.11, et en la comparant au libre parcours moyen de transport des électrons pour le cas de notre problème, relation 1.12 :

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \tag{1.11}$$

$$\lambda \ll \hbar \tag{1.12}$$

Dans le cas d'un gaz d'électrons, le libre parcours moyen l correspond à la distance moyenne séparant les particules composant le gaz. L'utilisation du formalisme classique doit donc satisfaire à la relation suivante :

$$pl \gg \hbar \tag{1.13}$$

$$\lambda \ll l \tag{1.14}$$

Avec p la quantité de mouvement d'une particule.
La distance moyenne entre les particules du gaz est donnée par $(V/N)^{1/3}$, avec V et N le volume et le nombre de particules, la vitesse $< v >$ est déduite de l'expression de l'énergie cinétique : $1/2m < v >^2 \sim k_B T$.

Application numérique dans le cas d'un gaz d'électrons

Pour l'hydrogène, la masse d'une molécule vaut deux fois celle du nucléon M_N, la longueur d'onde de de Broglie 1.11 donne :

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{4 M_N k_B T}} \sim 0.2\mathring{A} \quad \text{avec } l \sim 30\mathring{A} \tag{1.15}$$

Dans le cas d'un gaz d'électrons, l'approximation faite par Drude fonctionne bien.

Application numérique dans le cas des électrons d'un métal

Dans le cas d'un gaz d'électrons dans un métal, cette équation se généralise sous la forme suivante [28] :

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{4 \frac{M_N}{m_e} k_B T}} \sim 12\mathring{A} \tag{1.16}$$

où M_N et m_e représentent respectivement la masse d'un nucléon et la masse d'un électron. L'approximation classique n'est alors valable que si $\lambda \ll l$, l'idée de Drude impose une distance inter particulaire soit un libre parcours moyen de l'ordre du paramètre de maille. Dans le cas du cuivre, ce paramètre de maille est de : $a_{Cu} = 3.6\mathring{A}$. Dans ce cas, on constate que la théorie de Drude ne peut être utilisée dans une étude de transport sur réseau.

Autres restrictions

D'autres restrictions liées à la nature ondulatoire des électrons peuvent également subvenir. Prenons pour illustrer cette limitation classique/quantique, la limite de taille du système. Le temps de relaxation τ des électrons est lié à leurs vitesses moyennes par

la relation $\vec{v} = \frac{\vec{l_e}}{\tau}$, où l_e est le libre parcours moyen des électrons, soit la distance moyenne parcourue par les électrons entre deux collisions avec les sites du réseau. Cette théorie pour être valide d'un point de vue classique suppose que le libre parcours moyen l_e soit petit devant la dimension L du système. En revanche lorsque $l_e \sim L$, il est nécessaire de passer à un traitement quantique ou semi-classique, et de tenir compte de la nature ondulatoire des électrons.

Ainsi, il est clair que l'approximation classique de la théorie de Drude est erronée. Il sera nécessaire de traiter le problème de transport par le biais d'une théorie plus élaborée. On introduit ainsi le modèle semi-classique qui va nous permettre une plus grande lisibilité.

1.2 Théorie semi-classique de la conduction des électrons dans les métaux

1.2.1 Description du modèle

La théorie de Drude dans laquelle la vitesse des électrons est prise en utilisant la distribution de Boltzmann, et la correction de Sommerfeld dans laquelle la vitesse est calculée à partir de la distribution de Fermi-Dirac, sont toutes deux construites en considérant le potentiel des ions comme constant. La généralisation à un potentiel périodique basée sur la théorie de Bloch va donner lieu à la théorie semi-classique. L'équation de Boltzmann avec la fonction de distribution électronique permet ensuite de relier les propriétés de transport à la structurre de bandes. L'énergie de l'électron est donc quantifiée, chaque niveau séparé par des zones interdites. Les propriétés électroniques sont décrites par la distribution de Fermi-Dirac, ce qui permet de rendre compte de la nature quantique de l'électron.

La vitesse de l'électron est donnée par :

$$\vec{v}_n(k) = \frac{\vec{\nabla}_k \epsilon_n(k)}{\hbar} \tag{1.17}$$

avec n l'indice de bande d'énergie, $\vec{k}$ le vecteur d'onde et $\epsilon_n(k)$ l'énergie de l'électron dans un état $|nk>$ solution de l'équation de Schrödinger.

Il est intéressant de remarquer que :

- A très basse température, dans le cas d'un réseau parfait ne comportant aucun défaut, la théorie semi-classique indique que l'électron se déplace sans aucune diminution de sa vitesse moyenne (Eq. 1.17), malgré l'interaction électron réseau. Cependant, si l'électron a un vecteur d'onde en bord de zone de Brillouin, l'électron est réfléchi par les ions. Les charges ne peuvent traverser le cristal à cause des réflexions de Bragg.

- Dans le cas d'un réseau qui ne serait pas parfait, des défauts locaux peuvent donner lieu à une résistance à très basse température.

– Dans la gamme des hautes températures, l'interaction électrons-phonons sera dominante, et donnera naissance à une résistance.

Le modèle semi-classique repose sur la connaissance de la structure de bande du métal. Son principe est de lier la structure de bande d'énergie au transport de spin. On remarque ainsi que le potentiel périodique est traité de façon quantique. Cependant, dans ce modèle les champs extérieurs appliqués seront pour leurs parts traités de façon classique. Cette idée donne tout l'intérêt au modèle semi-classique, car comme nous allons le voir, le formalisme est semblable à celui de la physique classique, tout en tenant compte de la nature discrète de la théorie quantique, les électrons appartiennent à des bandes d'énergie. Prenons par exemple un électron à la position $\vec{r}$, avec un vecteur d'onde $\vec{k}$, et un indice de bande n. On impose des restrictions sur l'évolution temporelle de ces paramètres.

1. On ignore la possibilité de transition inter-bandes, n reste donc constant. Ce point impose que toutes les bandes pleines en dessous du niveau de Fermi ne contribuant pas au transport de spins peuvent être ignorées lors du traitement.

2. L'évolution temporelle de $\vec{r}$ et de $\vec{k}$ est déterminée par les équations du mouvement.

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_n(k) = \frac{\vec{\nabla}_k \epsilon_n(k)}{\hbar} \tag{1.18}$$

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\left(\vec{E}(r,t) + \frac{\vec{v}_n(k) \times \vec{B}(r,t)}{c}\right) \tag{1.19}$$

3. A l'équilibre thermique, la densité électronique de la bande n de vecteur d'onde $\vec{k}$ dans un volume $d\vec{r}d\vec{k}$ de l'espace des phases, est donnée par la distribution de Fermi-Dirac assurant le respect du principe de Pauli.

$$f(\epsilon_n(k))\frac{d\vec{k}}{4\pi^3} = \frac{d\vec{k}/4\pi^3}{e^{\beta(\epsilon_n(k)-\mu)}+1} \tag{1.20}$$

On note ϵ_n l'énergie d'un électron de la bande n et μ le potentiel chimique.

1.2.2 Limitation de la théorie semi-classique

La condition que l'on impose en ce qui concerne les transitions inter-bandes s'avère très restrictive, elle borne supérieurement l'intensité des champs électriques et magnétiques. C'est-à-dire que la valeur des champs appliqués ne doit permettre ni rupture électrique, ni rupture magnétique. L'énergie d'un électron est bornée par l'énergie de la bande à laquelle il appartient, la rupture intervient lorsque qu'un champ est assez intense pour forcer la transition d'un électron d'une bande à une autre, et ne satisfait plus aux conditions suivantes [33] :

$$eEa \ll \frac{\epsilon_{gap}^2(k)}{\epsilon_f} \tag{1.21}$$

$$\hbar\omega_c \ll \frac{\epsilon_{gap}^2(k)}{\epsilon_f a} \tag{1.22}$$

où ϵ_{gap} correspond à la largeur du gap, ϵ_f à l'énergie de Fermi et ω_c à la fréquence cyclotron.

Ordre de grandeur

Pour un champ électrique de 10^{-2} V/cm et un paramètre de maille a de l'ordre de l'angstrom, eEa est de l'odre de 10^{-10} eV. Si l'énergie de Fermi est de 1 eV, on atteint la limite pour un gap de 10^{-5} eV. Cette première condition est facilement satisfaite, les bandes interdites rencontrées dans les métaux étant de l'ordre de 10^{-1} eV. Dans le cas d'un champ magnétique tel que $\hbar\omega_c \sim 10^{-4}$ eV, la limite pour le gap est à 10^{-2} eV, l'utilisation du modèle est sujet à la prudence car cette limite peut être atteinte à champ fort.

Autres restrictions

Un autre point qui devra être respecté pour utiliser la théorie semi-classique, est de s'assurer que $\lambda_F \gg a$ où λ_F désigne la longueur d'onde des champs appliqués. Cette condition exprime l'idée de localisation du paquet d'onde.

Comme précédemment, on doit vérifier le principe d'incertitude de Heisenberg (Eq. 1.10). Un électron dans un métal possède typiquement une quantité de mouvement de l'ordre de $\hbar\vec{k}_f$ avec $\vec{k}_f$ le vecteur d'onde de Fermi. L'incertitude sur la quantité de mouvement $\delta\vec{p}$ doit donc être faible devant $\hbar\vec{k}_f$ pour justifier l'approche classique du problème. Nous savons que $k_f \sim \frac{1}{r_s}$ où r_s est de l'ordre de la distance inter-électronique moyenne, soit quelques angströms. L'incertitude sur la position doit donc vérifier :

$$\delta x \sim \frac{\hbar}{\delta p} \gg \frac{1}{k_f} \sim r_s \tag{1.23}$$

Une description classique s'avère donc impossible dans la mesure où les distances inter-électroniques sont de l'ordre des distances inter-atomiques. Cependant, les électrons de conduction dans les métaux ne sont pas liés à des ions particuliers du réseau mais se déplacent "librement" dans le métal.

Enfin, un dernier point auquel nous devons tenir compte dans l'utilisation de ce modèle : le libre parcours moyen l des électrons de conduction doit être grand devant la longueur de de Broglie. Cette condition impose l'idée de la localisation du paquet d'onde. Cependant, cette condition se vérifie car l'ordre de grandeur de l dans le cas des métaux est de l'ordre de $l = 100\mathring{A}$ à température ambiante, la condition 1.13 est vérifiée.
On remarque que contrairement au traitement fait par Drude dans lequel les vitesses sont sous-estimées, le passage à la théorie semi-classique dans laquelle la vitesse est déterminée à partir de la distribution de Fermi-Dirac est quant à elle bien adapté au traitement du problème.

1.2.3 Magnétorésistance

A la section 1.1.1, nous avons conclu que le traitement du problème avec le modèle de Drude ne rendait pas compte des observations expérimentales, la théorie ne prédit aucune dépendance entre la magnétorésistance et le champ magnétique appliqué, ou encore que la résistance de Hall ne dépend que de la densité d'électrons.
Reprenons le traitement de la magnétorésistance dans le cadre de la théorie semi-classique.

Comme précédemment, on applique un champ magnétique le long de l'axe z, et un champ électrique le long de l'axe x. Les expressions semi-classiques de vitesse et de force de Lorentz s'écrivent alors :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\vec{\epsilon}(\vec{k})}{\partial\vec{k}} \tag{1.24}$$

$$\hbar\frac{\partial\vec{k}}{\partial t} = \frac{-e}{c}\vec{v}(k)\times\vec{B} - e\vec{E} \tag{1.25}$$

On intègre sur le temps et on obtient :

$$\frac{c\hbar}{eB}\vec{u}_B\times\left(\vec{k}(t)-(\vec{k}(0)\right) = -\left(\vec{r}(t)-(\vec{r}(0)\right)+\left(\frac{c}{B}\vec{u}_B\times\vec{E}\right)t \tag{1.26}$$

où $\vec{u}_B$ est le vecteur unitaire dans la direction du champ magnétique et où l'énergie est donnée par :

$$\bar{\epsilon}(k) = \vec{\epsilon}(\vec{k}) - \hbar\vec{k}\left(\frac{c}{B}\vec{u}_B\times\vec{E}\right) \tag{1.27}$$

On peut alors discerner deux cas au temps $t=\tau$ selon que toutes les orbitales sont fermées ou non :

Cas 1 : Dans le cas où toutes les orbitales sont fermées, le terme $\vec{k}(\tau)-\vec{k}(0)$ (eq.1.26), est borné et devient négligeable pour de grands temps de relaxation τ :

$$\frac{\vec{r}(\tau)-\vec{r}(0)}{\tau} = \left(\frac{c}{B}\vec{u}_B\times\vec{E}\right) \tag{1.28}$$

$$\lim_{\omega_c\tau\to 0}\vec{j} = -\frac{nec}{B}\left(\vec{u}_B\times\vec{E}\right) \tag{1.29}$$

La conclusion de ce résultat peut être énoncé ainsi. Dans le cas où toutes les orbitales sont fermées, à la limite des grands τ, nous retrouvons le résultat de Drude en ce qui concerne la constante de Hall.

Cas 2 : Dans le cas où au moins une orbitale est ouverte, l'expression du courant est donnée par :

$$\vec{j} = \sigma^{(0)}\vec{n}.\left(\vec{n}.\vec{E}\right)+\sigma^{(1)}\vec{E} \tag{1.30}$$

où $\vec{n}$ désigne la direction de l'orbite ouverte dans l'espace réel. Lorsque le champ magnétique tend vers l'infini, on s'attend à ce que $\sigma^{(0)}$ tende à devenir constante, et à ce que $\sigma^{(1)}$ s'annule. En effet, $\vec{k}(\tau)-\vec{k}(0)$ n'a plus de limite dans le temps, et croît proportionnellement avec B. L'application d'un champ électrique $\vec{E}=E^{(0)}\vec{n'}+E^{(1)}\vec{n}$ donne la magnétorésistance suivante :

$$\rho = \frac{\vec{E}.\vec{j}}{j} = \frac{E^{(0)}}{j}\vec{n'}\vec{j} \tag{1.31}$$

A la limite des champs forts, lorsque $E^{(1)}\to 0$

$$\vec{j} = \sigma^{(0)}\vec{n}.E^{(1)}+\sigma^{(1)}\left(\vec{n'}.E^{(0)}+\vec{n}.E^{(1)}\right) \tag{1.32}$$

$$\vec{n'}.\vec{j} = \vec{n'}E^{(0)}.\sigma^{(1)}\vec{n'} \tag{1.33}$$

$$\rho = \frac{\left(\vec{n'}.\vec{j}\right)^2}{\vec{n'}\sigma^{(1)}\vec{n'}} \tag{1.34}$$

Comme à la limite des champs forts, la conductivité $\sigma^{(1)}$ tend vers zéro, la magnétorésistance dans le cas d'orbites ouvertes peut croitre sans limite avec l'augmentation du champ magnétique.

1.3 Equation générale du transport

1.3.1 Equation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann décrit l'évolution dans le temps de la fonction de distribution des particules de conduction. En l'occurence, ces particules sont des fermions, cette fonction à l'équilibre thermique est donc donnée par la distribution de Fermi-Dirac [26][97][33] :

$$f^0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} \tag{1.35}$$

où $\beta = (k_B T)^{-1}$, μ est le potentiel chimique et ϵ l'énergie de l'électron. En l'absence de collisions, l'équation d'évolution s'écrit :

$$\frac{\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t} + \frac{\vec{F}}{\hbar}\vec{\nabla}_k(f) + \vec{v}\vec{\nabla}_r(f) = 0 \tag{1.36}$$

Dès lors qu'il y a des collisions entre les particules, la fonction $f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)$ n'est plus conservée, on ajoute à la relation précédente un terme dépendant des collisions :

$$\frac{\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t} + \frac{\vec{F}}{\hbar}\vec{\nabla}_k(f) + \vec{v}\vec{\nabla}_r(f) = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} \tag{1.37}$$

Le terme de collisions fait intervenir la probabilité temporelle pour qu'un électron de Bloch dans un état $|k>$ soit diffusé vers un état $|k'>$. Une impureté du réseau agit sur un électron comme un centre diffuseur de masse $M \gg m_e$, la différence des masses impureté/électron indique que la quantité de mouvement de l'électron n'est quasiment pas modifiée lors d'une collision et que la diffusion est élastique. On construit donc le terme de collision en considérant le nombre d'électrons dans un élément de volume $d\vec{k}$ autour de $\vec{k}$. La théorie semi-classique impose qu'un électron ne peut changer de bande, et nous ajoutons pour le moment que le spin de l'électron reste inchangé. Le terme de difusion se traduit donc par la différence du nombre d'électrons entrant dans un élément de l'espace des phases $d\vec{k}$, avec le nombre d'électrons qui en sortent dans un intervalle de temps dt :

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{in} - \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{out} \tag{1.38}$$

Le terme décrivant le nombre de particules entrantes doit être compris comme la somme sur tous les états $|k'>$ pour qu'un électron ayant une probabilité d'existance $f(\vec{k'})$ soit diffusé avec la probabilité $\omega_{k'\to k}$ vers un état vide des $|k>$ de probabilité $1-f(\vec{k})$. On suit le même raisonnement pour les particules sortantes de l'élément de volume $d\vec{k}$.

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{in} = \left(1-f(\vec{k})\right)\int \frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\omega_{k'\to k} f(\vec{k'}) \tag{1.39}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{out} = f(\vec{k})\int \frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\omega_{k\to k'}\left(1-f(\vec{k'})\right) \tag{1.40}$$

L'équation de Boltzmann s'écrit donc :

$$\frac{\partial f\left(\vec{r},\vec{k},t\right)}{\partial t}+\frac{\vec{F}}{\hbar}\vec{\nabla}_k(f)+\vec{v}\vec{\nabla}_r(f)=$$
$$\int\frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\left[\omega_{k\to k'}f(\vec{k'})\left(1-f(\vec{k})\right)-\omega_{k'\to k}f(\vec{k})\left(1-f(\vec{k'})\right)\right] \tag{1.41}$$

L'équation de Boltzmann est une équation irréversible, c'est-à-dire qu'elle n'est pas invariante par inversion du temps, le système perd de l'information lors des collisions. L'irréversibilité provient de l'hypothèse semi-classique selon laquelle la fonction de distribution après collision est indépendante de celle avant collision. La difficulté majeure avec l'équation de Boltzmann réside dans le calcul de la probabilité de diffusion ω. Cette probabilité dépend de la nature des diffusions que l'on souhaite traîter. Il existe plusieurs types de diffusions :

- Diffusion par les phonons et les magnons : Il s'agit de diffusions liées respectivement aux vibrations d'ions autour des sites du réseau, et aux excitations d'ondes des spins des ions du réseau. L'effet de ces sources diffusives se caractérise par une augmentation de la résistance du matériau en fonction de la température.

- Diffusion par des impuretés : En pratique, un réseau cristallin n'est jamais parfait, on parle dès lors de défauts pour caractériser des lacunes, des joints de grains ou encore des ions d'autres espèces atomiques contaminant un matériau donné. Ces impuretés peuvent être magnétiques ou non-magnétiques et ont pour effet d'altérer le vecteur d'onde et d'inverser le spins des porteurs de charges.

- Diffusion électron-électron : Ce type de diffusion s'observe dans des matériaux très purs à basse température.

Quelque soit la nature des diffusions, elles doivent satisfaire au principe du bilan détaillé, c'est-à-dire qu'à l'équilibre, chaque processus de diffusion et son inverse doivent se produire avec la même probabilité. Cela impose que la fonction de distribution à l'équilibre doit être solution du terme de collision de l'équation de Boltzmann :

$$\left.\frac{\partial f^0}{\partial t}\right|_{coll} = 0 \tag{1.42}$$

où f^0 est la partie à l'équilibre de la distribution.
Il existe beaucoup de travaux sur la thématique du transport faisant appel à l'équation de Boltzmann. Dans chacune des études, les auteurs choisissent d'exprimer la probabilité de diffusion de différentes manières. Citons par exemple Kasuya [53] qui utilise l'interaction d'échange entre les porteurs de charges et les spins du réseau, Haas [46] utilise quant à lui la règle d'or de Fermi, Kataoka [55], ...
Developpons le terme de collision dans le cas d'impuretés statiques comme l'a fait Haas.

$$\omega_{k\to k'}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|<\vec{k'}|V_i|\vec{k}>\right|^2\delta(\epsilon_k-\epsilon_{k'}) \tag{1.43}$$

où V_i décrit le potentiel perturbateur jouant le rôle de centre diffuseur. Dans le cas de la théorie des perturbations, nous devons prendre soin de ne traiter que de faibles potentiels.

On distingue maintenant deux types de diffusion :

- Les diffusions inélastiques lors desquels un échange d'énergie a lieu lors de la collision.

- Les diffusions élastiques qui ont lieu si l'énergie échangée entre les états $|k>$ et $|k'>$ lors de la diffusion est zéro (ou très faible par rapport à l'énergie initiale de l'électron pour être ignorée).

  Dans ce cas :

$$\text{Si } \epsilon_k \neq \epsilon_{k'},\ \omega_{k\to k'} \text{ et } \omega_{k'\to k} \text{ s'annulent.}$$
$$\text{Si } \epsilon_k = \epsilon_{k'},\ \omega_{k\to k'} = \omega_{k'\to k}$$

Dans ce dernier cas, le terme de collision de l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = \int \frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\omega_{k\to k'}\left[f(\vec{k'}) - f(\vec{k})\right] \tag{1.44}$$

1.3.2 Approximation du temps de relaxation

En supposant que la distribution $f(\vec{k})$ hors équilibre n'est pas trop éloignée de la fonction $f^0(\vec{k})$ à l'équilibre soit que : $f^1(\vec{k}) \ll f^0(\vec{k})$, et en utilisant l'approximation du temps de relaxation :

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\frac{f^1(\vec{k})}{\tau_k} \tag{1.45}$$

La fonction de distribution est décrite par deux termes, le terme d'équilibre $f^0(\vec{k})$ et hors équilibre $f^1(\vec{k})$ et :

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) + f^1(\vec{k}) \tag{1.46}$$

Le temps de relaxation s'exprime donc par :

$$\tau^{-1}(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\omega_{k\to k'}\left[1 - \frac{\vec{k'}\vec{E}}{\vec{k}\vec{E}}\right] \tag{1.47}$$

Dans le cas où la seule source de perturbation est un champ électrique :

$$f^1(\vec{k}) = \tau(\vec{k})\vec{v}_k\left(\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k}\right)e\vec{E} \tag{1.48}$$

Pour finir notons que dans un matériau les porteurs de charges peuvent interagir avec plusieurs sources de diffusion. Lorsque les sources de diffusion sont indépendantes les unes des autres, l'intégrale de diffusion s'écrit comme la somme des intégrales de chaque source. Dans l'approximation du temps de relaxation cela se traduit par :

$$\tau^{-1}(\vec{k}) = \sum_i \tau_i^{-1}(\vec{k}) \tag{1.49}$$

Cette expression est connue sous le nom de loi de Matthiessen. Cette condition d'indépendance entre chaque processus de diffusion est difficile à prouver et plusieurs articles [75] en donnent une variante qui la généralise :

$$\tau^{-1}(\vec{k}) \geq \sum_i \tau_i^{-1}(\vec{k}) \tag{1.50}$$

1.4 Méthode Monte Carlo & physique de la matière condensée

La principale difficulté liée à l'étude de la physique de la matière condensée est due au grand nombre de particules qui composent les systèmes. Partons du point où un système se trouve à l'équilibre thermodynamique. Dans ce cas, nous pouvons utiliser la physique statistique. L'idée repose alors sur la connaissance de la fonction de partition dans un ensemble statistique donné, et à partir duquel les observables physiques que nous souhaitons étudier pourront être moyenné. La connaissance de cette fonction de partition nécessite de sommer sur l'ensemble des états microscopiques du système. En théorie, ces états sont solutions de l'équation de Schrödinger, mais le nombre d'états est si grand qu'il est impossible de réaliser cette somme. Ce problème peut paraitre inextriquable, il trouve néanmoins une solution en concédant à certaines approximations. Aussi, nombre de méthodes théoriques ont vu le jour dans l'étude des systèmes de la matière condensée [123]. On peut citer la méthode de champ moyen, le groupe de renormalisation, les fonctions de Green, les matrices de transfert, etc...
Depuis les années 1950, une nouvelle approche a vu le jour avec la démocratisation et les avancés spectaculaires de l'informatique. Il s'agit des méthodes de simulations numériques qui viennent aujourd'hui compléter l'expérimentation et la théorie [23][29][26].

Pour aborder le problème du point de vue numérique nous devons en particulier répondre à deux questions :
Dans un premier temps, comment faire converger le système vers un régime hors équilibre mais stationnaire ? Dans un second temps, une fois ce régime stationnaire atteint, comment moyenner les observables pertinentes dans le cadre de notre étude ? C'est deux questions font l'objet des sections 1.4.1 & 3.2.1 qui vont suivre.

1.4.1 Eléments de physique statistique

La physique statistique repose sur l'étude de système à l'équilibre dans un ensemble statistique. Il existe plusieurs ensembles, en ce qui nous concerne, nous nous sommes intéressés à l'étude de nos systèmes dans l'ensemble canonique $[N, V, T]$ dans lequel un système est caractérisé par un nombre de particules N, un volume V, ainsi qu'une température T fixé. Comme nous l'avons déjà souligné, l'approximation des grandeurs thermodynamiques est conditionnée par la connaissance de la fonction de partition $\mathcal{Z}$:

$$\mathcal{Z} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} e^{-\beta E(\mathcal{C}_i)} \qquad \text{avec} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T} \tag{1.51}$$

où $\mathcal{N}$ correspond au nombre total de microétats et k_B est la constante de Boltzmann.
La fonction de partition représente la somme des probabilités liées à chacun des états

microscopiques. Le poid statistique d'un état particulier $\mathcal{C}_i$ s'écrit donc tel que :

$$P(\mathcal{C}_i) = \frac{e^{-\beta E(\mathcal{C}_i)}}{\mathcal{Z}} \tag{1.52}$$

Ainsi, la moyenne d'une grandeur particulière A a pour expression :

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} A(\mathcal{C}_i)P(\mathcal{C}_i) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{A(\mathcal{C}_i)e^{-\beta E(\mathcal{C}_i)}}{\mathcal{Z}} \tag{1.53}$$

Nous verrons dans ce qui suit que les fluctuations des grandeurs thermodynamiques s'avèrent extrêmement importantes en ce qui concerne l'interprétation de la physique. Comme précédemment, prenons une grandeur particulière A soumise à une excitation B. La fluctuation de A lorsque celle-ci est soumise à B s'écrit tel que :

$$\frac{\partial < A >}{\partial B} \tag{1.54}$$

il s'agit de la réponse ou suceptibilité de $< A >$ à B. L'écart-type étant les fluctuations autour de la moyenne, il est aisé d'établir l'expression de la suceptibilité de la grandeur A :

$$\left\langle (A - < A >)^2 \right\rangle = < A^2 > - < A >^2 \tag{1.55}$$

$$< A > = \frac{1}{\beta}\frac{\partial ln(\mathcal{Z})}{\partial B} = \frac{1}{\beta}\frac{\mathcal{Z}'}{\mathcal{Z}}\Big|_B \tag{1.56}$$

$$< A^2 > = \frac{1}{\beta^2}\frac{\mathcal{Z}''}{\mathcal{Z}}\Big|_B \tag{1.57}$$

$$< A^2 > - < A >^2 = \frac{1}{\beta^2}\left(\frac{\mathcal{Z}''}{\mathcal{Z}} - \frac{\mathcal{Z}'^2}{\mathcal{Z}^2}\right) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial < A >}{\partial B} \tag{1.58}$$

$$\frac{\partial < A >}{\partial B} = \beta\left(< A^2 > - < A >^2\right) \tag{1.59}$$

Lors des simulations il sera indispensable de calculer des grandeurs telles que l'énergie interne du système, l'aimantation (notre paramètre d'ordre), la suceptibilité magnétique et la capacité calorifique. Un récapitulatif des différentes grandeurs physiques est donné ci-dessous :

$$\mathcal{Z}(T,B)$$

$$\downarrow$$

Energie libre :
$$\mathcal{F} = -k_B T ln(\mathcal{Z})$$

$$\swarrow \qquad \downarrow \qquad \searrow$$

Energie interne :
$$E = -\frac{\partial ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta}$$

$$\downarrow$$

Capacité calorifique :
$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_B = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial^2 ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta^2}\right)$$

Entropie :
$$S = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_B$$

Aimantation :
$$M = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B}\right)_T$$

$$\downarrow$$

Suceptibilité magnétique :
$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = \beta \left(\frac{\partial^2 ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta^2}\right)$$

Chapitre

2 Modèles théoriques

2.1 Introduction

L'étude liée à la diffusion des électrons dans la matière est à ce jour un vieu problème pour lequel de nombreuses questions restent en suspend à ce jour. De nombreuses études expérimentales et théoriques ont tenté d'identifier l'origine du comportement de résistance en fonction de grandeurs thermodynamiques telles que température, pression, etc... Nous allons voir que derrière l'évolution de la résistance, il existe plusieurs mécanismes à l'origine des formes prises par cette grandeur physique. En effet, la résistance d'un matériau peut être définie comme la capacité de résister aux porteurs qui traversent la matière. Ajoutons que les électrons se propagent à travers un matériau en interagissant avec les atomes de ce matériau. Un gradient de température, un dopage du matériau, des défauts cristallins, une contrainte mécanique ou encore la géométrie d'un échantillon peuvent induire une modification intrinsèque des propriétés de transport du matériau à l'origine de la résistance. Historiquement, la première source de diffusion à avoir été mise en évidence, est la diffusion par les phonons, fonction de la température. Plus la température est élevée, plus le réseau d'atomes est fortement vibré, plus le matériau a une résistance élevée. A basse température, $R \propto T^5$, et au-delà de la température de Debye, c'est-à-dire lorsque tous les modes de phonons sont activés, $R \propto T$ (loi de Bloch) [102][95]. Une seconde source de diffusion est liée à l'ordre géométrique du réseau. En effet, la périodicité et la pureté d'un réseau cristallin influent sur la diffusion. La troisième source de diffusion concerne les matériaux magnétiques qui présentent une aimantation spontanée à basse température (ferromagnétique, ferrimagnétique, antiferromagnétique, etc). Dans ces matériaux la température va progressivement détruire l'ordre magnétique des ions du réseau et affecter leur résistance. Loin au-dessous de la température de transition magnétique, il a été mis en évidence que les ondes de spins jouent un rôle sur la diffusion des porteurs, ayant pour conséquence d'augmenter la résistance par un terme $R \propto T^2$. A l'approche de la température de transition, le rôle des fluctuations critiques des spins du réseau est encore mal compris et reste un sujet controversé : si certains matériaux exhibent un pic de résistivité à la transition, d'autres n'en présentent pas. Pour l'exemple, nous présentons deux courbes de résistivité en fonction de la température. La première, figure 2.1A, ne présente pas de pic à la transition (seule sa derrivée par rapport à la température en présente un), la seconde, figure 2.1B, en présente un. L'ensemble de cette thèse se concentre sur cette région de température, avec un accent particulier sur les paramètres intervenant à proximité de la transition.

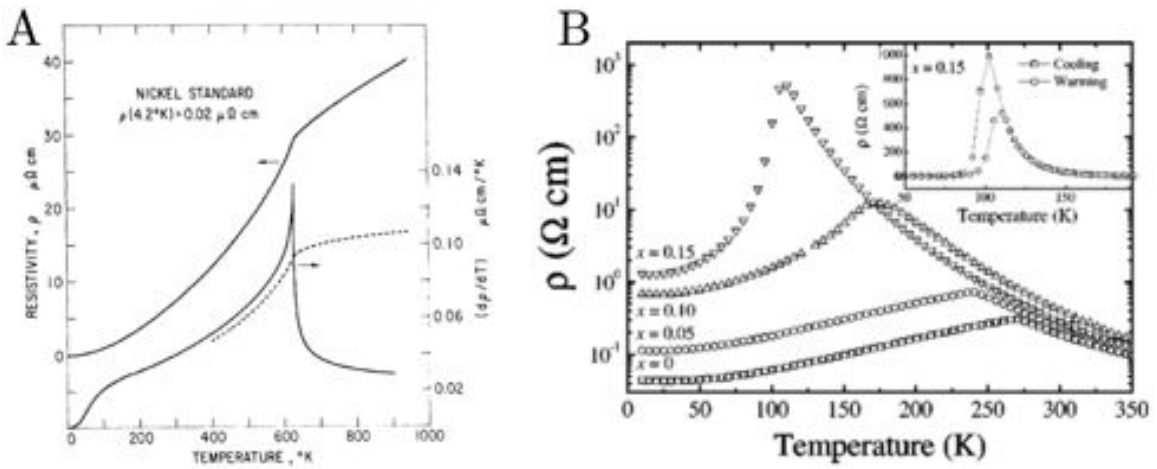

FIGURE 2.1 – A : *Résistivité d'un échantillon de nickel en fonction de la température. La résistivité ne présente pas de pic à T_c, seule sa dérivée par rapport à la température en présente un. Courbe tirée de l'article de Schwerer et al. [102].* B : *Résistivité du semiconducteur $La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO_3$ pour différentes stœuchiométries x en fonction de la température. Cette courbe est tirée de l'article de Souza et al. [107].*

2.2 Modèles et outils théoriques de transport dans les métaux magnétiques

2.2.1 Relier l'ordre magnétique à la résistivité magnétique

Mott est le premier à donner une explication au changement de pente observé à proximité de la température de Curie [83]. Selon lui, ce phénomène indépendant des phonons doit être compris par le comportement des bandes d'énergie "s" et "d". La différence de masse effective m^* entre les deux bandes le conduit à considérer un courant d'électrons "s". La bande "d" est beaucoup plus étroite que la bande "s". L'interaction "s-d" est donc à l'origine du comportement de la résistance. Ce comportement doit être directement fonction du caractère de la bande "d" du matériau. Cette explication n'est pas convaincante pour l'ensemble des matériaux, car même pour les métaux de transitions dans lequels outre la bande "d", la bande "f" est présente.
Kasuya [53][54] contredit cette première explication en prenant pour exemple les terres rares, dans lesquels les couches "f" forment des bandes fines. Le processus de transition décrit par Mott dans ces matériaux est très peu probable, et la caractérisation expérimentale de ces matériaux laisse malgré tout clairement apparaitre un changement de pente autour de la température de Curie. Turov [111][8][119][41] va utiliser les ondes de spins et démontrer un comportement en T^2 à basse température, en accord avec les résultats expérimentaux. Cette théorie semble bien expliquer le comportement de R avant la transition, mais prédit une résistance constante après la température de Curie. Autrement dit, aucune décroissance de résistance n'est visible après la température de transition. Si cette méthode semble valide à basse température, elle échoue au-delà de T_c. Kasuya va reprendre le modèle à deux orbitales "s-d", et constater deux choses : La première, que les interactions coulombiennes des porteurs avec les électrons localisés des ions rendent compte de la même périodicité que les ions du cristal à basse température. La

seconde, que l'orientation du spin des porteurs modifie l'énergie d'échange des électrons avec le réseau. Kasuya construit un modèle par le biais du champ moyen, et établit le raisonnement suivant : à température nulle, la résistance s'annule du fait d'un ordre magnétique parfait du réseau. A température finie, les ondes de spin sont excitées et la résistance augmente. Après T_c, le réseau est dans un état complètement désordonné et la température n'a plus d'effet, la résistance est constante. Il note également que plus la longueur des spins du réseau est importante, plus la résistance magnétique est grande. Il établit ainsi une corrélation entre la résistance magnétique et les interactions des électrons avec les spins du réseau. Cette conclusion est déterminante car l'ensemble des travaux postérieurs, aussi généraux soient-ils vont reposer dessus.

2.2.2 Utilisation de la fonction de corrélation comme probabilité de diffusion

Pierre Gilles de Gennes et Jacques Friedel vont faire un rapprochement entre le comportement des résistivités dans les métaux magnétiques et la forme de la suceptibilité magnétique [24]. Lors d'une transition du second ordre, la suceptibilité magnétique des spins du réseau exhibe un pic à la température de transition, comme la résistivité de certains matériaux. Dans cette gamme de températures, le système est très fortement corrélé. Les auteurs ont alors la conviction que cette forte corrélation est à l'origine du pic de résistivité. En effet, la fonction de corrélation rend compte du degré de stabilité du système. Plus le système est instable, plus les spins du réseau fluctuent. En conséquence, les fluctuations sont responsables du désordre magnétique du système et de la diffusion des spins qui le traversent. Cette idée pousse les auteurs à développer un modèle dans lequel ils utilisent la fonction de corrélation comme probabilité de diffusion.

Le Hamiltonien d'interactions électrons itinérants-ions sur un réseau est décrit par :

$$\mathcal{H}_{e^-/ion} = G\sum_i \vec{S}_i\vec{\sigma}_e\delta(\vec{r}-\vec{R}_i) \tag{2.1}$$

Dans cette expression, $\vec{r}$ représente la position des électrons et $\vec{R}_i$ celle des spins du réseau. $\vec{S}_i$ et $\vec{\sigma}_e$ sont respectivement les spins du réseau et des électrons de conduction.

de Gennes et Friedel expriment le temps de relaxation par :

$$\frac{\tau_0}{\tau} = \frac{2\pi}{\sigma_0}\int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(1-cos(\theta))sin(\theta)d\theta \tag{2.2}$$

et déterminent par l'approximation de Born la section efficace de diffusion.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma_0}{4\pi}\sum_i \Gamma(\vec{R}_i)e^{i\vec{K}.\vec{R}_i} \tag{2.3}$$

$$\text{avec :}\quad \sigma_0 = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{mG}{\hbar^2}\right)S(S+1) \quad \text{et} \quad \Gamma(\vec{R}_i,T) = \frac{\left[<\vec{S}_i.\vec{S}_0> - <\vec{S}>^2\right]}{S(S+1)} \tag{2.4}$$

Les auteurs vont alors développer le calcul dans deux cas :

1. Premièrement, ils établissent une expression de la résistivité dans l'approximation de collision élastique sans corrélations. La section efficace de diffusion et le temps de relaxation s'écrivent alors :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_0 \left(\frac{S(S+1) - < S >^2}{S(S+1)} \right) \tag{2.5}$$

$$\frac{\tau_0}{\tau} = 1 - \frac{< S >^2}{S(S+1)} \tag{2.6}$$

On remarque que la résistance est fonction de $< S >$, qui est un paramètre d'ordre. Lorsque $T > T_c$, c'est-à-dire à des températures pour lesquelles le système est désordonné, de Gennes et Friedel font le même constat que Kasuya : la résistance est constante. Dans ce calcul de résistivité, seule la contribution du magnétisme est prise en compte. Aussi, les auteurs proposent une extrapolation de leur théorie avec des mesures expérimentales réalisées sur un échantillon de gadolinium Gd, et un alliage d'or-manganèse $AuMn$. Ce dernier matériau est magnétique, mais n'exhibe pas de pic à la transition. Ils retranchent la contribution des phonons sur la résistance des deux échantillons afin de ne rendre compte que de la résistivité magnétique, et constatent que la théorie rend assez bien compte des mesures expérimentales (figure 2.2).

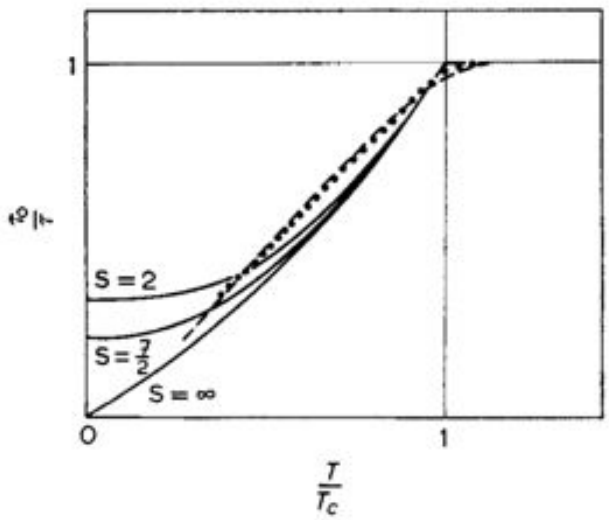

FIGURE 2.2 – *Courbes inverses des temps de relaxation renormalisés par la méthode de De Gennes et Friedel sans prise en compte des corrélations [24]. Les comparaisons sont effectuées pour Gd (traits pointillés) et AuMn (ligne discontinue).*

2. Dans un second temps, les auteurs reprennent le problème en considérant les corrélations à toutes les distances, afin de mettre en évidence l'anomalie magnétique observée dans certains matériaux magnétiques.

Ils expriment alors le temps de relaxation :

$$\frac{\tau_0}{\tau} = \frac{1}{4}\int_0^2 \frac{x^3 dx}{1 - \frac{T_c}{T}\frac{sin(k_0 dx)}{k_0 dx}} \quad \text{avec} \quad x^2 = 2(1 - cos(\theta)) \tag{2.7}$$

Cette expression permet de rendre compte de la décroissance de la résistivité après la température de transition pour de faibles vecteurs d'ondes $k_0 d \ll \pi$ où d représente le paramètre de maille. Pour de grands vecteurs d'ondes $k_0 d \geq \pi$, ils observent une diminution du pic de résistivité (cf. figure 2.3).
Les auteurs concluent sur le fait que les différents caractères des résistivités magnétiques, selon qu'elles exhibent un pic ou non, est une conséquence du degré de corrélation des spins du réseau. Pour de faibles corrélations la résistivité au-delà de la température de transition est constante. Dans le cas de fortes corrélations, la résistivité exibe un pic à la température critique.

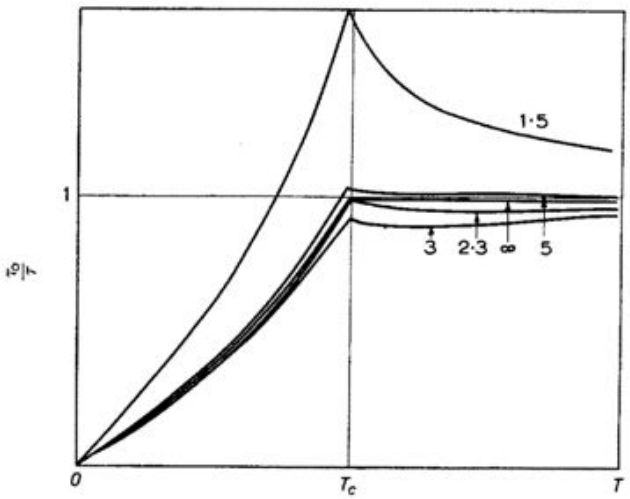

FIGURE 2.3 – *Courbes des temps de relaxation renormalisés inverses par la méthode de De Gennes et Friedel avec prise en compte des corrélations [24]. Les courbes sont tracées pour différentes valeurs de $k_0 d$.*

Fisher et Langer [39] vont faire un certain nombre de critiques quant au modèle et aux conclusions de De Gennes et Friedel [24]. La principale critique concerne l'attribution du pic de résistivité. Pour de Gennes et Friedel, le pic est une conséquence des fluctuations à longues portées de l'aimantation au voisinage de la température critique. Cependant, la valeur du pic prédite par cette théorie est en désacord avec les mesures expérimentales faites sur le nickel. De plus la sommation qu'effectuent les auteurs sur la fonction de corrélation spin-spin, est réalisée sur toutes les distances interatomiques R_i. Dans le cas de fortes corrélations, la sommation sur des spins dont la distance interatomique est supérieure au libre parcours moyen entraînerait des diffusions incohérentes. Or, le libre parcours moyen d'un électron restant une quantité finie, même à travers une région critique, Fisher et Langer pensent qu'il n'est pas acceptable d'attribuer le pic de résistance au seul argument de corrélations spin-spin à longues portées.
Les auteurs vont reprendre le modèle de De Gennes et Friedel, et postuler sur les corrélations spin-spin à courtes portées. Ils ajoutent au traitement fait par De Gennes et Friedel une

fonction d'écrantage construite autour du libre parcour moyen l, afin de limiter la sommation sur la longueur des corrélations. Cette fonction d'écrantage est exprimée comme suit :

$$p(R) = e^{-R/l} \tag{2.8}$$

$$\frac{\tau_0}{\tau} = \sum_{s=0}^{\infty} \nu_s f(R_s) p(R_s) \Gamma(R_s) \tag{2.9}$$

Dans cette dernière expression, ν_s représente le nombre d'électrons dans la cellule s de rayon R_s, $f(R)$ est la fonction de décroissance oscillante suivante :

$$f(R) = \frac{1}{4k_f^4 R} \frac{d^2}{dR^2} \left(\frac{cos(2k_f R) - 1}{R} \right) \tag{2.10}$$

Enfin $p(R)$ représente la fonction d'atténuation spatiale des corrélations entre spins du réseau, et Γ la fonction de corrélation.
Les auteurs réalisent un traitement complet en commençant par fixer $R_s = 0$. Dans ce cas les différents termes de l'équation 2.9 ont pour valeur $f(0) = 1$, $p(0) = 1$ et :

$$\Gamma(0) = \frac{\tau_0}{\tau}\Big|_{R_s=0} = 1 - \frac{< S >^2}{S(S+1)} \tag{2.11}$$

On retrouve l'expression 2.6 établie par De Gennes et Friedel dans laquelle la résistivité est proportionelle au carré de l'aimantation avant la transition et constante au-delà de T_c. Dans le cas où $R_s \neq 0$, comme de Gennes et Friedel, les auteurs obtiennent une discontinuité à T_c. Cette discontinuité est infinie pour de faibles vecteurs d'onde, et finie pour de grands vecteurs d'onde.

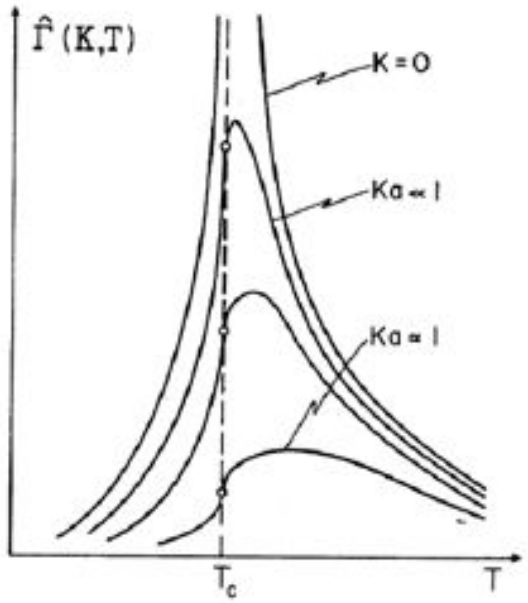

FIGURE 2.4 – *Comportement qualitatif de l'évolution de la fonction de corrélation spin-spin du réseau, fonction de la longueur d'onde K avec a le paramètre de maille [39].*

Métaux ferromagnétiques

Le modèle de Kataoka [55] représente sans doute le condensé le plus complet des théories construites pour décrire les métaux magnétiques de la famille des terres rares. Kataoka s'inspire du modèle $s-d$ de Kasuya, c'est-à-dire un modèle dans lequel les électrons de conduction s sont diffusés par les électrons d localisés sur les sites du réseau. Kataoka résout l'équation de Boltzmann dans l'approximation du champ moyen en considérant la fonction de corrélation comme probabilité de collision [24][39]. Kataoka va mettre plusieurs points en évidence dans son article :

- Comment la diffusion non-magnétique et le libre parcours moyen fini des porteurs affectent-ils le comportement de la résistance en fonction de la température.

- Comment se comportent les deux familles de spins itinérants "up" et "down" lors du transport dans les solides, comment affectent-ils la résistance et quel est l'impact de l'application d'un champ magnétique extérieur.

- Comment la densité de porteurs affecte-elle les courbes de résistance.

- Enfin, comment évolue la résistance magnétique lorsque l'on modifie le degré d'instabilité de l'état ferromagnétique.

Kataoka formalise le problème de la façon suivante. Il commence par écrire le Hamiltonien :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} a^{+}_{k,\sigma} a_{k,\sigma} - \frac{J_{sd}}{N}[< S_z(q) > (a^{+}_{k+q,\uparrow} a_{k,\uparrow} - a^{+}_{k+q,\downarrow} a_{k,\downarrow}) \\ &+ S_{-}(q) a^{+}_{k+q,\uparrow} a_{k,\downarrow} + S_{+}(q) a^{+}_{k+q,\downarrow} a_{k,\uparrow}] \end{aligned} \tag{2.12}$$

avec ϵ l'énergie d'un électron dans l'approximation du champ moléculaire de spin $\sigma_z = \pm 1$, J_{sd} l'interaction d'échange entre les électrons itinérants et les spins du réseau, $S(q)$ la transformée de Fourier d'un spin du réseau.

$$\epsilon_{k,\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*_\sigma} - J_{sd} < S_z > \sigma_z - \frac{1}{2} g \mu_B H \sigma \tag{2.13}$$

L'équation 2.12, est adaptée afin de prendre en compte la nature du spin et sa capacité à se renverser, nous n'écrirons que le terme de collision :

$$\begin{aligned}\left(\frac{df_\sigma(k)}{dt}\right)_{coll} = & \left(\frac{J^2_{sd}}{\hbar N^2}\right) \sum_{k'} [f_\sigma(k')(1 - f_\sigma(k)) w(k'\sigma, k\sigma) \\ & - f_\sigma(k)(1 - f_\sigma(k')) w(k\sigma, k'\sigma)] \\ & + \left(\frac{J^2_{sd}}{\hbar N^2}\right) \sum_{k'} [f_\sigma(k')(1 - f_\sigma(k)) w(k'\sigma, k\sigma) \\ & - f_\sigma(k)(1 - f_\sigma(k')) w(k\sigma, k'\sigma)] \end{aligned} \tag{2.14}$$

Kataoka introduit ici la probabilité de diffusion comme la fonction de corrélation des spins du réseau, ainsi :

$$w(k\sigma, k'\sigma) = \left(\frac{J_{sd}^2}{\hbar N^2}\right) \int \langle < S_z(k-k',0) >< S_z(k'-k,t) > \rangle \, e^{iT_{\sigma\sigma}(k,k')t} dt \quad (2.15)$$

$$w(k\sigma, k'\sigma^-) = \left(\frac{J_{sd}^2}{\hbar N^2}\right) \int \langle < S_{\sigma^-\sigma}(k-k',0) >< S_{\sigma\sigma^-}(k'-k,t) > \rangle \times e^{iT_{\sigma\sigma^-}(k,k')t} dt \quad (2.16)$$

avec $T_{\sigma\sigma^-(k,k')=\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{k'\sigma^-}}$ l'énergie de transfert d'un électron entre les états $|k\sigma >$ et $|k'\sigma^- >$. L'approximation du temps de relaxation dans l'hypothèse de la fonction de distribution faiblement hors équilibre permet à Kataoka d'exprimer l'expression de la résistivité magnétique comme la somme des deux courants de spins :

$$\rho = \frac{3}{2e^2}\left[\frac{< \tau_\uparrow >}{m_\uparrow^*} + \frac{< \tau_\downarrow >}{m_\downarrow^*}\right]^{-1}$$

La probabilité de diffusion est déterminée à partir de la fonction de corrélation pour donner une forme analytique à cette fonction, Kataoka écrit le Hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H}_{spin} = \frac{-J}{N}\sum_q \left(< S_z(q) >< S_z(-q) > + \frac{1}{2}\left[S_+(q)S_-(-q) + S_-(q)S_+(-q)\right]\right) - \sum_i \left(2J_{eff}(0) < S_z > + H\right) S_{iz} \quad (2.17)$$

$$J_{eff}(q) = J_1 cos(\frac{aq}{2}) - J_2 cos(aq) \quad (2.18)$$

avec J_1 et J_2 positif, et a le paramètre de maille. Le premier terme correspond à l'état ferromagnétique et le second terme empêche son établissement (un effet de frustration). Enfin, le champ moyen permet de déterminer la suceptibilité magnétique parallèle :

$$\chi_\parallel = \frac{NS^2(g\mu_B)^2 B'_S}{k_B T - 2ZJS^2 B'_S} \quad (2.19)$$

et détermine les fonctions de corrélation suivante :

$$\langle < S_z(q) >< S_z(-q) > \rangle = \frac{NS^2 k_B T B'_S}{k_B T_c \left(T/T_c + (a\kappa_0^\parallel)^2\right) - 2S^2 J_{eff}(q) B'_S} \quad (2.20)$$

$$\langle < S_x(q) >< S_x(-q) > \rangle = \langle < S_y(q) >< S_y(-q) > \rangle = \frac{NSk_B T B_S}{g\mu_B H_m \left(1 + (a\kappa_0^\perp)^2\right) - 2SJ_{eff}(q) B_S} \quad (2.21)$$

On reconnaît la fonction de Brillouin $B_S(g\mu_B\beta S H_m)$ avec B'_S sa dérrivée première. H_m correspond au dernier terme du Hamiltonien et κ_0, introduit phénoménologiquement, fixe une limite à la longueur de corrélation. Ce dernier paramètre permet de rendre compte de l'importance de la portée des interactions, remarque déjà faite par Fisher et Langer. Finalement l'expression de la résistivité est donnée par :

$$\rho = \rho_0 S(S+1)(W/\epsilon_F) r(t) \quad (2.22)$$

Kataoka exploite ensuite son modèle et trace différentes courbes de résistivité. On constate ainsi que le pic de résistivité s'accentue avec la diminution de la densité d'électrons (cf. figure 2.5A). L'effet du libre parcours moyen fini introduit phénoménologiquement dans l'expression de la corrélation montre qu'une diminution de l_0 tend à affaiblir le pic à la transition (cf. figure 2.5B), en accord avec les comparaisons faites entre les travaux de De Gennes et Friedel et de Fisher et Langer. Enfin, la dernière figure 2.5C souligne qu'accentuer l'instabilité du réseau contribue à accentuer le pic de résistivité à T_c.

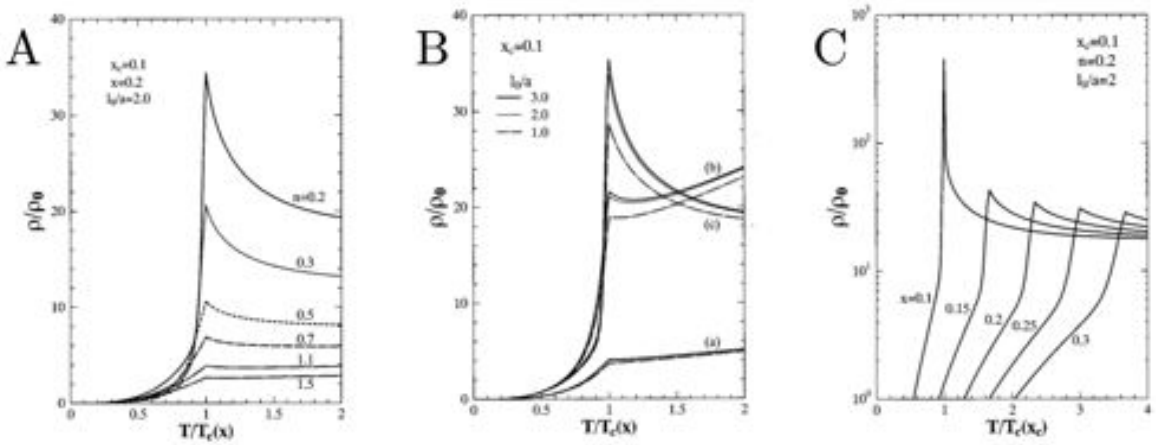

FIGURE 2.5 – *Courbes de résistivité en fonction de la température, avec variation de plusieurs paramètres. Les courbes présentées sont issues de l'article de Kataoka [55]. A : Variation de la densité de porteurs. B : Variation de la longueur de libre parcours moyen. C : Variation du paramètre d'instabilité du réseau.*

Métaux antiferromagnétiques

Suezaki et Mori [121] vont s'intéresser pour leur part aux métaux antiferromagnétiques. Ils construisent un modèle "$s-d$" et reprennent les idées de De Gennes et Friedel [24] et de Fisher et Langer [39], c'est-à-dire de faire intervenir l'ordre magnétique du réseau par le biais des fluctuations critiques autour de la transition. Ils vont principalement se concentrer sur la forme de la différentielle de résistance dR/dT autour de la température de Néel (cf. expressions 2.23). Ils considèrent qu'avant la température de transition, $T < T_N$, l'anisotropie magnétique et les fortes fluctuations des spins d du réseau sont responsables de la diffusion des électrons de conduction s, qui peuvent présenter deux comportements en fonction de la longueur des corrélations. Les auteurs montrent que le comportement des résistances avant la température critique est extrêmement sensible à la forme de la sphère de Fermi. Après la transition, $T > T_N$, l'anisotropie magnétique conduit à un autre type de diffusion. L'idée de Suezaki et Mori consiste donc à comparer les résistances de part et d'autre de T_N afin d'observer les différentes formes des résistances.

$$\frac{dR}{dT} \propto \epsilon^{-(\alpha-\gamma-1)} \quad \text{pour} \quad t > T_N \tag{2.23}$$

$$\frac{dR}{dT} \propto \epsilon^{-(\alpha+\gamma)/2} \quad \text{pour} \quad t < T_N \tag{2.24}$$

où ϵ correspond à la température réduite :

$$\epsilon = \frac{T - T_N}{T_N}$$

α, γ étant les indices critiques respectifs de la chaleur spécifique et de la susceptibilité. Les deux expressions précédentes mènent au constat suivant.

- Lorsque la longueur des corrélations $1/\kappa$ est grande devant la longueur caractéristique du réseau $1/K$, $1/\kappa \gg K$, cas des corrélations de longues portées, les indices critiques donnent respectivement $\alpha = 0$ et $\gamma = 4/3$. Dans ce cas la résistance magnétique présente un pic à T_N.

- Dans le cas inverse, $1/\kappa \ll 1/K$, la résistance se comporte comme l'ont décrit Fisher et Langer, c'est-à-dire une résistance ne présentant pas de pic.

Mentionnons une autre étude menée par Richard et al. [98][99] dans laquelle ils utilisent également les fonctions de corrélation afin de mettre en évidence le comportement de la résistance antiferromagnétique. Dans ce travail, ils prennent en compte la parité des fonctions de corrélation afin de rendre compte de l'inversion de spins dans les antiferromagnétiques. Ils montrent que dR/dT se comporte comme la chaleur spécifique, sans pic de résistance à T_N. Ils soulignent le bon accord du modèle avec trois solides, Dysprosium, Holmium et le composé Fe_3Al.

Alexander [3] et al. vont reprendre les différentes études dans le cas des métaux et des semiconducteurs ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Ils font un point relativement critique sur l'ensemble des travaux précédents. En soulignant le fait qu'aucune théorie ne semble capable d'expliquer l'ensemble des comportements observés expérimentalement et finissent par présenter quatre comportements caractéristiques concernant les formes des résistances selon le type de matériaux (voir figure 2.6).
Selon Alexander, les métaux de transition suivent le comportement décrit par la théorie de Fisher et Langer et bénéficient donc d'une théorie appropriée à leur description, une partie des terres rares présente le même comportement que les métaux de transition. Cependant, ce n'est pas le cas de l'ensemble des solides appartenant à cette famille. Par exemple $GdNi_2$ présente un pic à la température de transition. Les prédictions réalisées sur les semiconducteurs, présentent deux comportements un pic de résistivité pour les matériaux ferromagnétiques et une transition sans pic pour les antiferromagnétiques. Voyons ce qu'il en est.

2.3 Modèles théoriques de transport dans les semiconducteurs

Le travail réalisé par Fisher et Langer [39] a été d'une aide précieuse dans l'étude de la résistance de nombreux métaux magnétiques. En effet, dans ce type de conducteurs magnétiques, la résistance n'exhibe pas de pic à la transition dans la plupart des cas. Cependant, la découverte des semiconducteurs [7] et plus récemment des systèmes complexes tels que les manganites et les pnictides [21][84][61][65][107][73], ou encore les semiconducteurs dilués [126][64][63][69][71] reposent la question de l'origine d'un pic de

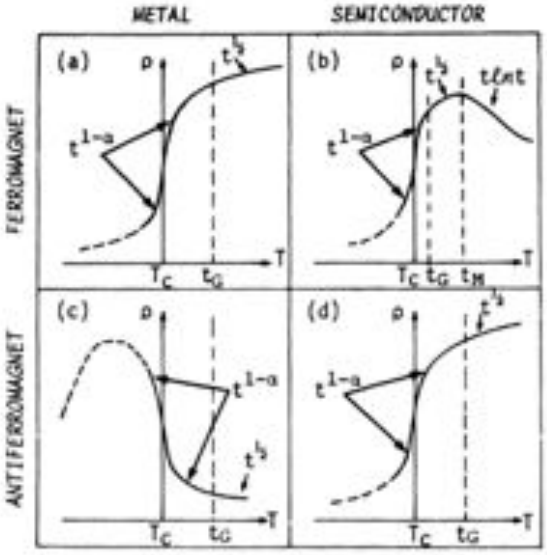

FIGURE 2.6 – *Différents comportements de résistivité exprimés par Alexander [3] pour les métaux et semiconducteurs ferromagnétiques et antiferromagnétiques.*

résistance autour de la température de transition. Une étude de Littlewood et al. traite en détail ce point [63] et rappelle l'échec de la théorie de Fisher et Langer à rendre compte des comportements de résistance dans les semiconducteurs. Contrairement aux métaux, les effets diffusifs de ces matériaux sont principalement dues aux impuretés et aux phonons. Lorsque ces semiconducteurs sont magnétiques, ils présentent une grande capacité à diffuser les électrons, du fait de leurs fortes interactions avec les spins du réseau. La résistance des semiconducteurs présente presque toujours un pic prononcé de résistance autour de T_c.

Le premier modèle à traiter des semiconducteurs a été présenté par Haas [46] en 1968. Cette théorie fait appel comme pour les métaux magnétiques à la fonction de corrélation et aux fluctuations critiques des spins. Haas construit son modèle en utilisant un potentiel d'interaction V (équation 2.25) avec la théorie des perturbations.

$$V = \sum_n J(r - R_n) s S_n \tag{2.25}$$

avec s le spin itinérant, S_n le spin du site n du réseau. Il considère le potentiel relativement faible pour être traité comme une perturbation, et ne pas avoir d'influence sur l'ordre magnétique du réseau. Il commence son étude par un système ferromagnétique $CdCr_2Se_4$ [7] et poursuit le travail pour les antiferromagnétiques. Il formalise le modèle à l'aide de l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation. L'idée de de Gennes et Friedel est reprise, et l'ordre magnétique du réseau est intégré au modèle par le biais de la fonction de corrélation des spins du réseau. Haas montre dans le cas ferromagnétique que la mobilité des porteurs (inversement proportionnelle à la résistance) décroît des basses températures jusqu'à la température de Curie (cf. figure 2.7). Après la température de transition, la mobilité augmente puis sature à haute température.

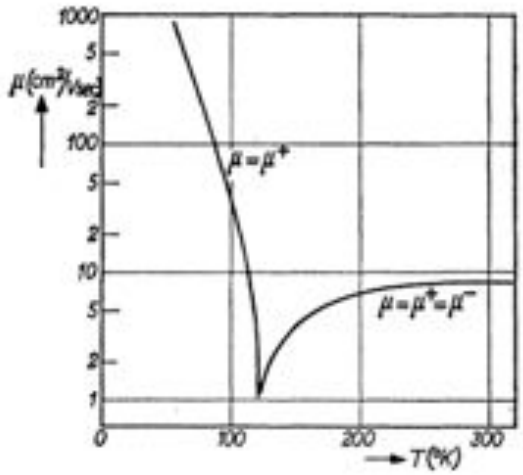

FIGURE 2.7 – *Mobilité des électrons à travers une structure ferromagnétique pour un semiconducteur non-dégénéré. Courbe tirée de l'article de Haas [46].*

Dans le cas ferromagnétique, la tendance extraite de ce modèle est en accord qualitatif avec de nombreux résultats expérimentaux [7][104][60][106]. Mais l'étude conduite dans le cas des antifferomagnétiques est en désaccord avec les expériences. En effet, si le modèle de Haas rend compte d'un pic de résistance à T_c pour les ferromagnétiques, la résistance des antiferromagnétiques n'en présente pas. Haas prend comme exemple un semiconducteur antiferromagnétique composé de Manganèse et de Tellurium $MnTe$ pour appliquer sa théorie. Il conduit son étude en prenant un jeu de paramètres en accord avec les valeurs expérimentales, et présente la mobilité des porteurs figure 2.8.1. En comparaison, nous présentons une courbe expérimentale en figure 2.8 issue de l'article de He et al. [47] réalisée sur $MnTe$. On constate entre les deux courbes un bon accord en ce qui concerne la température de Néel, et un désaccord en ce qui concerne la forme de la résistance à T_N.

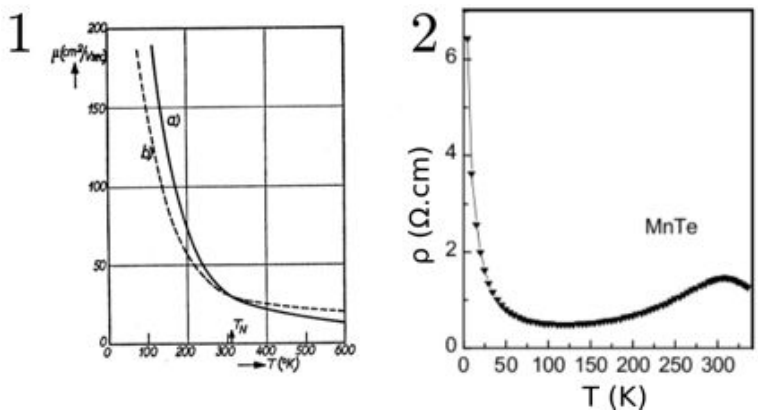

FIGURE 2.8 – 1. *Mobilité des électrons à travers une structure ferromagnétique pour un semiconducteur non-dégénéré, courbe tirée de l'article de Haas [46]*, 2. *Résistivité mesurée expérimentalement pour $MnTe$ courbe tirée de l'article de He et al. [47].*

2.3.1 Localisation et désordre sur réseau

Si le premier modèle de transport dans les semiconducteurs faisait assez naturellement appel à la fonction de corrélation pour expliquer le pic de résistance magnétique, d'autres hypothèses n'ont pas tardé à voir le jour. On peut par exemple citer des méthodes faisant appel aux polarons magnétiques [69][63], à la diffusion par inversion critique des spins itinérants [91], aux fluctuations de spins dans un modèle à six bandes [64], ou encore le modèle de Nagaev [84] sur la diffusion par impuretés magnétiques. La plus part de ces théories se sont concentrées à décrire l'existence d'un pic de résistance, mais bien souvent pour des matériaux dont le caractère est plus proche des métaux que de matériaux non-métalliques. De plus, ces théories se limitent à une gamme de températures restreinte autour de T_c. On ne peut citer que peu de théories traitant de la conduction des semiconducteurs sur une large gamme de températures. Deux études récentes répondent cependant à ces contraintes, et mettent en avant un phénomène tout à fait intéressant : la localisation des porteurs par des impuretés à proximité de T_c.
Les premiers auteurs à mettre en évidence l'effet de la localisation sont Skalsky et al. [105] par le biais d'une étude expérimentale traitant de l'alliage $PdFe$. Les auteurs vont apporter de nouvelles perspectives à la problèmatique de transport par le biais de ce travail, l'idée de localisation des porteurs à l'origine d'un pic de résistivité.
Zarand reprend cette idée dans une étude théorique de transport dans des systèmes désordonnés dont les impuretés magnétiques induisent un phénomène de localisation des porteurs [126]. Son travail est destiné à calculer et interpréter des courbes de résistances magnétiques dans des semiconducteurs ferromagnétiques dilués et non-dilués. Zarand utilise la théorie de la localisation d'Anderson et construit un modèle de saut de longueur ξ représentant la longueur sur laquelle les impuretés piègent les porteurs. L'idée est la suivante : l'équation de la localisation s'exprime ainsi par Eq. 2.26

$$\frac{dln\,(g(2L))}{dln(L)} = \beta(g) \tag{2.26}$$

avec $g(L)$ la conductance, et L la taille du solide. Cette équation ne dépend que du désordre et de la taille du réseau. Lorsque $g \gg 1$, $\beta(g) \sim 1$, et $g \ll 1$, $\beta(g) \sim ln(g)$, le passage d'un comportement de g à l'autre est relié par une valeur critique de la conductance $g(l_c)$, où l_c est la longueur mésoscopique critique du système. Cette valeur correspond à la transition d'un régime dans lequel prend place le phénomène de localisation. On distingue ainsi deux comportements fonctions de l_0 :

$$\text{Si } g(l_0) > g(l_c),\ g(L) = \sigma L^{d-1} \tag{2.27}$$

$$\text{Si } g(l_0) < g(l_c),\ g(L) \sim e^{\frac{-2L}{\xi}} \tag{2.28}$$

où σ représente la conductivité, d la dimension du système et ξ la longueur de localisation. A trois dimensions, lorsque $g(l_0) \to g(l_c)$, ξ diverge et se comporte tel que $\xi \sim (g(l_c) - g(l_0))^{-\nu}$, la conductivité suit alors le comportement suivant $\sigma \sim (g(l_0) - g(l_c))^{\nu}$, avec ν l'exposant dynamique.
Zarand considère alors des moments magnétiques Ω_i en interaction avec les électrons itinérants. Il prend en compte le ralentissement critique des fluctuations autour de T_c,

et traite le problème de façon classique. Même si de ce point de vue les seuls moments magnétiques ne peuvent être responsables de localisation d'Anderson, le désordre local qu'induisent ces moments magnétiques est suffisant à provoquer une localisation des porteurs à proximité des sites qu'ils occupent.

Par le biais de calculs numériques, Zarand détermine $g(l_0)$ fonction de la distribution des moments magnétiques $P(\Omega_i)$, et introduit la température par le biais d'une méthode de hopping qui conduit à l'expression de conductivité suivante :

$$\sigma \sim exp\left[-C\left(\frac{\Delta_\xi(P)}{T}\right)^{1/4}\right] \tag{2.29}$$

Les résultats de cette théorie présente des courbes de résistance comportant un pic à T_c, dont la hauteur est en bon accord avec les résultats expérimentaux des matériaux magnétiques complexes, et des semiconducteurs magnétiques dilués (cf. figure 2.9B). L'idée de Zarand consistant à traiter les moments magnétiques du réseau comme des centres diffuseurs statiques responsables de la localisation des porteurs est une idée nouvelle qui vient enrichir les mécanismes diffusifs qui prennent places dans les semiconducteurs magnétiques. Comme le souligne Zarand, cette théorie suggère que les fluctuations critiques des spins du réseau ne jouent qu'un rôle mineur sur l'apparition du pic de résistance à T_c.

Alvarez et al. [4][5][6] font une série d'études similaires à celle de Zarand par le biais de simulations Monte Carlo. Comme ce dernier les conclusions apportées par les auteurs soulignent l'existence d'un mécanisme de localisation des porteurs dans les semiconducteurs dilués. Sen et Alvarez [128] poursuivent ces premiers travaux, et exploitent leurs méthodes numériques afin d'étudier le comportement générique des résistivités de semiconducteurs dilués en fonction de la température, et de différentes conditions initiales apportées à leur modèle : contribution de la densité de porteurs sur les formes des résistivités, interactions plus ou moins intenses entre les électrons de conduction et le réseau etc... Les conclusions sont en accord avec celle de Kataoka bien que les deux théories traitent respectivement de semiconducteurs dilués et de métaux magnétiques présentant un pic à T_c. Cependant, le point le plus important est la mise en évidence de l'origine du pic de résistivité, conséquence directe de l'effet de localisation des porteurs dans le réseau. Les auteurs se concentrent également sur le rôle joué par les phonons en addition aux interactions magnétiques du système. Ils soulignent que ces deux effets cumulés génèrent un pic d'autant plus haut en résistance que le désordre du système est important.

Bien que nous n'étudions pas de systèmes dilués dans le cadre de cette thèse, notre étude de transport dans les semiconducteurs magnétiques souligne également l'existence d'un phénomène de localisation des spins itinérants, dont l'origine est tout à fait différente de celle donnée par Zarand, Sen et Alvarez [67][68].
Comme le souligne l'ensemble des auteurs dont nous avons présenté les travaux, l'interaction des spins itinérants avec le réseau joue un rôle déterminant sur la dynamique des spins traversant le réseau. En fonction de la température à laquelle est porté ce réseau, nous pouvons décrire succinctement l'ordre magnétique de ce dernier de la façon suivante :

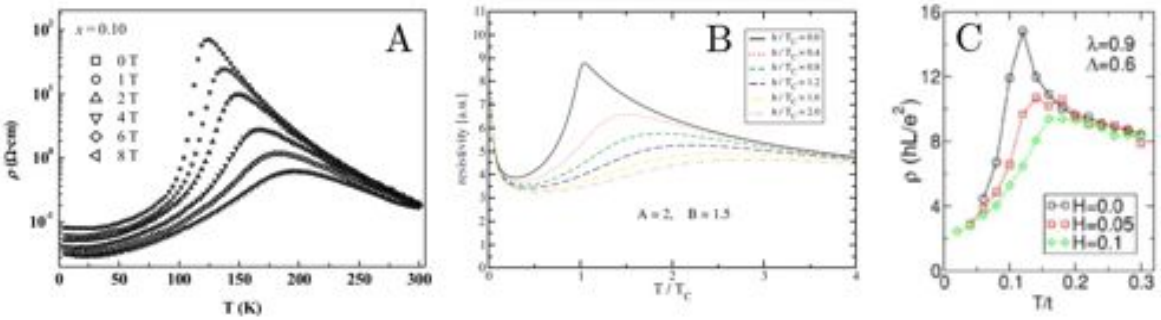

FIGURE 2.9 – *Courbes de résistance en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétique. Figure A correspond à des courbes expérimentales extraites de l'article de Li [61] sur la caractérisation de* $La_{0.67-x}Y_xCa_{0.33}MnO_3$ *de stoechiométrie* $x = 0.10$. *Figure B présente les courbes issues de la théorie de transport par localisation de Zarand dans les semiconductuers dilués [126]. Figure C montre les courbes issues de l'article de Sen et al. [128] calculées à partir des simulations Monte Carlo basées sur le modèle à deux bandes.*

- A basse température, le réseau présente un ordre magnétique. Par exemple, dans le cas ferromagnétique le système est majoritairement composé de spins up.

- A haute température, le réseau ne présente pas d'ordre magnétique, le système est paramagnétique.

- Près de la température de transition T_c, le système présente un enchevêtrement de régions ordonnées de spins up (clusters up) et down (clusters down).

Près de T_c, ces domaines up (down) représentent autant de zones de basses (hautes) énergies, dans lesquelles les électrons vont avoir tendance à se localiser (déserter), donnant lieu à l'apparition d'un pic de résistance. Nous reviendrons en détail sur ce point dans le chapitre 4.

2.4 Comportement des résistivités des quatre familles de matériaux magnétiques

L'ÉTUDE de la résistance magnétique débute dans les années 1950 et connait un développement qui va s'étaler sur une trentaine d'années. Il existe de nombreux résultats expérimentaux qui mettent en évidence le comportement de la résistance magnétique au voisinage de la température de transition, selon le type de matériau la forme de la résistance peut présenter des comportements très diverses et fonction de nombreuses grandeurs : température, champ magnétique externe ou encore pression à laquelle est soumis un échantillon. Alors que certains métaux magnétiques ne présentent pas de pic à la température de transition, [11][88][93][56][85], d'autres présentent un pic de résistivité à T_c, [59][76][90]. Un ouvrage très complet sur le sujet a été publié par Mizutani [79].

Ces différents comportements sont généralement décrits par le biais de la différentielle dR/dT, et sont formalisés par l'expression suivante :

$$\frac{dR}{dT} = A\left(\frac{|T - T_c|}{T_c}\right)^{\lambda} \tag{2.30}$$

Nous avons présenté plusieurs théories visant à décrire les différents comportements observés expérimentalement. Dans la plupart des cas, les méthodes théoriques permettent de rendre compte des résultats expérimentaux, toutefois certains cas font exception. Synthétisons les différents comportements dans les quatre grandes familles de matériaux magnétiques, et soulignons les confusions, les difficultés et les incohérences qui subsistent encore dans l'interprétation des formes de résistances à proximité de la transition.

– **Métaux magnétiques**

Les métaux de transition (atomes dont la couche d est incomplète) : comme pour tous les matériaux magnétiques, cette première famille présente un comportement en $R \propto T^2$ à basse température. Dans le cas des mesures expérimentales réalisées sur des matériaux purs tels que Fe, Co, Ni, Pd, Pt ferromagnétiques, le comportement de la résistance magnétique ne présente pas de pic à la transition [120]. Cette dernière se comporte comme l'énergie interne du système donnant à la différentielle un comportement similaire à la chaleur spécifique C_v comme l'ont décrit Fisher et Langer [39].

Les terres rares ferromagnétiques : Dans la plupart des cas, ces matériaux se comportent comme l'ont décrit Fisher et Langer [39]. C'est-à-dire un comportement de résistance analogue à l'énergie interne du système, sans pic à la température de transition, et dont la dérrivée dR/dT est analogue à la chaleur spécifique ($A > 0$, $\lambda = \alpha$ avec α l'exposant critique de la chaleur spécifique). Il convient cependant de remarquer que certains terres rares présentent un pic de la résistance à la transition ($dR/dT < 0$ à $T > T_c$) [22].

Les terres rares antiferromagnétiques : Les résultats expérimentaux de plusieurs matériaux semblent en bon accord qualitatif avec les prédictions de Suezaki et Mori [121], cependant les exposants critiques ne sont pas toujours en accord avec cette théorie. Comme pour le cas ferromagnétique, il est à noter que dans certains composés tels que les cubiques simples PrB_6, $GdSb$ et $HoSb$, le comportement des résistances magnétiques est en désaccord les descriptions théoriques des auteurs car la résistance présente bien un pic à la transition.

– **Semiconducteurs magnétiques**

Semiconducteurs ferromagnétiques : La plupart des matériaux semiconducteurs montrent un pic à la température de transition, c'est également le comportement prédit par Haas [46], par Zarand [126], par Vuillet [116]. Ces théories ne rendent cependant pas compte des comportements expérimentaux des matériaux tels que : $CdCr_2Se_4$ et EuO [60][7] qui ne présentent aucun pic à la transition. En effet, les alliages sont plus complexes à analyser.

Semiconducteurs antiferromagnétiques : La théorie de Haas et de Suezeki et Mori en ce qui concerne les semiconducteurs antiferromagnétiques ne rend pas compte de l'existence d'un pic de la résistance magnétique. Force est de constater que de très nombreux résultats expérimentaux en présentent un [9][20][62][112][47] avec $A < 0$ et $\lambda \sim 0.4$.

Alliages et systèmes désordonnées : Les différentes approches réalisées sur ce type de matériaux ont rencontré quelques difficultés. Par exemple, la loi d'évolution des résistances fonction de la température en T^2 pour les alliages de Nickel échoue [93][37]. Pour des ferromagnétiques dilués tels que $PdFe$ et $PdMn$ par exemple, Skalsky et al. [105] et Mills et al. [78] montrent que la résistance comporte deux termes, cohérent (collision électron-magnon avec conservation des k) et incohérent (non conservation des k). Le terme incohérent est ici proportionnel à $T^{3/2}$, le terme cohérent est proportionnel à T^2 à basse température.

Verres de spins : Campbell va étudier les verres de spins, et utiliser la densité d'état calculée par Walker et Walsteds pour construire un modèle dédié au calcul de la résistivité de ce type de matériau. Il va obtenir un bon accord avec $AuFe$ dans lequel la résistance ne présente pas de pic à la transition. Il poursuit son travail afin de généraliser le comportement de résistance à d'autres échantillons [16][17], et obtient un bon accord avec de nombreux matériaux $AuMn$, $AuCr$, $AuMn$ et $AgMn$.

Il ressort de ce constat qu'une seule théorie capable de rendre compte de l'ensemble des matériaux magnétiques en faisant varier seulement des paramètres physiques n'éxiste pas pour le moment. Plus grave encore, chaque théorie utilise des hypothèses plus ou moins contradictoires, par exemple les théories de De Gennes et Friedel [24] et de Fisher et Langer [39], Les résultats de Haas [46], de Suezaki et Mori [121] et Alexander [3]. Si les premiers travaux menés dans les années 1950 ont conclu de façon unanime à attribuer le pic de résistance aux fluctuations critiques du réseau, de nouveaux travaux théoriques pointent les effets de localisations des porteurs en interaction avec les impuretés du réseau, ce qui est le cas du travail de Zarand ou encore de Alvarez et al. [5]. Pour notre part, et par le biais d'un modèle numérique bien différent des travaux antérieurs nous observons également différents comportements dépendant des paramètres fixés : des pics de différentes formes autour de la température de transition dépendant des modèles d'interactions, des géométries des réseaux étudiés, du temps de relaxation, de la portée des interactions, ...

2.5 Conclusion

La première théorie concernant la résistance magnétique est attribuée à Kasuya [53][54]. Dans son étude, Kasuya utilise un modèle $s-d$ dans lequel s représente les électrons de conduction diffusés par les ions magnétiques d localisés sur le réseau. Kasuya développe son calcul autour de l'évolution de l'ordre magnétique du réseau en fonction de la température. Cette théorie reproduit bien les comportements de résistivité décrits précédemment,

cependant elle ne tient pas compte des effets d'ordre à courte portée. De Gennes et Friedel [24] vont reprendre la question et avoir l'idée astucieuse de relier la résistivité magnétique à la fonction de corrélation spin-spin du réseau, et vont identifier l'origine du pic de résistivité comme la conséquence des fluctuations critiques autour de T_c. Cette dernière théorie va faire l'objet de critiques de la part de Fisher et Langer [39]. Les auteurs font remarquer qu'il n'est pas réaliste de considérer des libres parcours moyens infinis à travers un réseau cristallin, et ajoutent que si cela était le cas, la longueur d'onde des fluctuations seraient supérieures aux libres parcours moyens des charges. Par conséquent, ces fluctuations ne peuvent être responsables de la diffusion des porteurs, hormis pour de faibles nombres d'ondes. Nous pouvons également citer les articles de Haas pour les semiconducteurs magnétiques [46], qui utilise la théorie des perturbations et traite le problème par le formalisme de Boltzmann, ainsi que le travail réalisé par Kataoka et al. [55]. Aujourd'hui encore, l'origine d'un pic de résistance à T_c reste une question controversée. Cependant des articles récents apportent un nouveau regard sur les mécanismes de diffusion à l'origine du pic de résistance. Zarand [126] par exemple étudie la question par le biais d'un modèle reposant sur la théorie de la localisation. Il met en évidence qu'à la température de transition le désordre induit un phénomène de localisation des spins itinérants dans certaines zones du réseau, et provoque l'apparition d'un pic de résistance à T_c. Nous attribuons également l'origine du pic de résistance magnétique à un phénomne de localisation des spins itinérants [68][66][67]. Cependant, l'origine de cette localisation est différente de celle évoquée par Zarand pour les systèmes dilués. Dans le cas des semiconducteurs magnétiques que nous étudions, nous constatons qu'à la transition, le réseau subit un ralentissement critique et arbore un état magnétique composé d'un enchevêtrement de clusters up et down. Le ralentissement critique en addition avec la structure de clusters sont responsables de la localisation des spins de conduction.

Chapitre

3 Simulation Monte Carlo appliquée aux modèles de transport de spins

3.1 Contexte de l'étude

Au chapitre précédent nous avons décrit des travaux fondateurs qui ont permis de faire émerger dans les années 1950 une nouvelle source de diffusion ayant pour origine le magnétisme de certains matériaux conducteurs, reposant sur l'interaction d'échange entre spins. Ces différents travaux [53][54][24][39][46], soulignent l'importance du rôle joué par les corrélations spin-spin sur les propriétés de transport. Avant de détailler et de justifier notre modèle numérique, présentons les différents aspects à considérer dans le cadre d'une étude de transport de spins dans des matériaux magnétiques en couches minces, nos motivations et nos objectifs.

En premier lieu, plusieurs aspects liés aux matériaux magnétiques sont à considérer :

- **Modèles de spin et interactions** : spin d'Ising, spin d'Heisenberg, spin XY, classique ou quantique,...

- **Le type de magnétisme porté par le réseau** : ferromagnétique avec ou sans impuretés, antiferromagnétique avec ou sans impuretés, réseaux magnétiques frustrés, verres de spins, matériaux amorphes,...

- **Méthodes d'investigation** : champ moyen, groupe de renormalisation, structures électroniques, méthodes de simulation,...

Dans un second temps, nous souhaitons étudier la dynamique des électrons itinérants à travers un réseau magnétique en fonction de la température. Dans notre modèle, les électrons se déplacent sous l'action d'un champ électrique, d'un gradient de concentration, en présence ou non d'un champ magnétique extérieur. Le déplacement des électrons est sujet à différentes sources de diffusions liées à leurs interactions mutuelles ainsi qu'avec le réseau local. Ces interactions dépendent des propriétés intrinsèques du matériau dans lequel ils circulent. Enfin, nous devons prendre en compte les effets de la température agissant sur les différentes sources de diffusion. On peut citer quelques sources principales :

- Les phonons qui constituent la première source de diffusion électronique qui fut identifiée dans les solides conducteurs magnétiques et non-magnétiques. Les atomes d'un solide interagissent entre eux par le biais de forces de diverses natures en fonction du solide. A température nulle, les atomes sont parfaitement ordonnés dans l'espace. A température non-nulle, les atomes oscillent collectivement autour de leurs positions d'équilibre. Les phonons se caractérisent donc par des déplacements collectifs des atomes du réseau en fonction de la température : plus la température est élevée, plus l'amplitude des vivrations est forte.

- La seconde source de diffusion dont l'effet est visible à basse température est due aux défauts cristallins et aux impuretés présents sur le réseau : dislocations, joints de grains, etc,... Selon la nature de ces impueretés, la dépendance en température de la résistance est différente.

- La troisième source est due à l'ordre magnétique du réseau. Elle ne concerne que les matériaux magnétiques et dépend également de la température. A basse température, le réseau porte un ordre magnétique propre au matériau (ferromagnétique, antiferromagnétique,...). A très basse température cet ordre est parfait, à température non-nulle les ondes de spin sont excitées. Ces excitations collectives sont dues aux interactions d'échange entre les spins : les spins s'écartent de leur axe de quantification. Ces déviations (ou amplitudes des ondes de spin) sont de plus en plus fortes au fur et à mesure que la température croît. A la température de transition T_c, l'ordre magnétique est détruit, les spins deviennent désordonnés (état paramagnétique) pout $T > T_c$.

Quelle que soit la source diffusive étudiée, il n'est pas surprenant que les propriétés de transport dépendent fortement de la température par le biais des interactions qu'entretiennent les électrons avec le réseau. Nous allons ainsi défénir les principales interactions dont nous devons tenir compte dans une étude de transport électronique :

Différentes interactions des électrons de conduction avec le réseau :

Interaction électron-phonon

Dans le cadre de cette thèse, nous ne tiendrons pas compte de l'effet des phonons sur les différentes courbes de résistivité. Notre approche se concentrera principalement sur les mécanismes de diffusion et de transport de spins liés à l'état magnétique du réseau en fonction de la température. Lors des comparaisons que nous ferons entre nos résultats de simulations (sans interactions électron-phonon) et les résultats expérimentaux comportant une contribution de l'ensemble des sources diffusives, **nous examinerons uniquement la contribution magnétique de ces dernières**.
La diffusion des électrons par les phonons est relativement bien comprise. La résistivité attribuée aux seuls phonons permet de distinguer deux régimes :

- Lorsque $T \ll \Theta_D$: la résistivité des électrons varie en T^5.

- Lorsque $T \gg \Theta_D$: le temps de relaxation des électrons varie en T

TABLE 3.1 – Températures de Debye pour quelques métaux

Métal	Θ_D $[K]$
Na	159
Fe	420
Ar	215
Cd	160
Pt	425

avec Θ_D la température de Debye, température au-delà de laquelle tous les modes normaux de vibrations commencent à être excités. On donne dans le tableau 3.1 les températures de Debye de quelques métaux [33].

Interaction électron-électron

L'interaction électron-électron contient deux termes : un terme d'interaction directe indépendant du spin et un terme d'interaction d'échange entre spins parallèles. Nous rappelons que dans le cas d'un gaz d'électrons très dilué à température nulle, l'état fondamental du gaz est ferromagnétique [26]. A température non nulle, une partie des spins vont s'inverser par agitation thermique donnant naissance à deux populations de spins : "up" & "down", dont l'une est majoritaire par rapport à l'autre. A température infinie, les deux populations sont égales. Dans le cas des spins itinérants traversant un réseau magnétique, les spins seront polarisés par le réseau, les concentrations des deux populations suivent l'état magnétique du système.

Interaction électron-magnon

Dans le cas d'une interaction de Heisenberg, la température induit une agitation des spins du réseau. Les spins en interactions vont donner lieu à un mouvement collectif appelé onde de spin. La quantification des ondes de spin donne des quasi-particules dites "magnons" par analogie avec "phonons". Dans le cas de spins de Heisenberg, pour une onde de spin donnée, les composantes transverses des spins oscillent, alors que la composante S_z reste une constante de mouvement qui ne dépend que de la température. Dans le cas de spins d'Ising (réseau rigide), les ondes de spin ne peuvent être excitées, et la température induit la posibilité d'un renversement du spin. La composante S_z se traduit comme la résultante de la somme de tous les spins qui composent le réseau. On peut calculer la valeur moyenne thermique de S_z par différentes méthodes dont la plus simple est la théorie du champ moyen. Examinons quelques exemples.

Modèles d'interaction :

- Un traitement par champ moyen a la particularité de donner le même comportement de l'aimantation quels que soient la dimension et le modèle de spin utilisé. Un autre inconvénient de la théorie du champ moyen, est que cette théorie néglige les fluctuations instantanées des spins. Ceci a pour effet de surrestimer les valeurs des températures critiques. En effet, les fluctuations favorisent le désordre, et ne

TABLE 3.2 – Températures de transitions renormalisées fonction du type de réseau cristallin et de la dimension des structures

Dimension	Réseau	Ising : T_c/J	Champ moyen : T_c/J
1		0	2
2	carré	2.269185314	4
2	triangulaire	3.6410	6
2	nid d'abeilles	1.5187	3
3	cubique	4.515	6
3	bcc	6.32	8
3	diamant	2.7040	4
4	hypercube	6.68	8

pas tenir compte de ces fluctuations revient à augmenter la température de transition. Enfin, pour des systèmes de dimension un ou deux, les fluctuations de spins sont tellement fortes qu'elles détruisent l'ordre magnétique à température non-nulle pour de nombreux systèmes dont les interactions sont à courtes portées. Or à ces basses dimensions, la théorie de champ moyen prédit des transitions à température non-nulle, ce qui est incorrecte.

– Le modèle d'Ising possède des solutions analytiques exactes à une et deux dimensions. A une dimension, aucune transition n'a lieu à température finie. Cependant, à deux dimensions le modèle d'Ising à champ nul possède une transition à température non-nulle (loi de Onsager [92]). On dresse dans le tableau suivant un comparatif des températures de transition entre la théorie de champ moyen et celles connues pour le modèle d'Ising [26] :

– Pour les spins de Heisenberg avec interaction ferromagnétique à courte portée, la théorie de magnons donne dans le cas tridimensionnel une aimantation $M = M_0 - BT^{3/2}$ (loi de Bloch) à basse température. Par contre, dans le cas des dimensions un et deux, il n'y a pas d'ordre à longue portée à température non-nulle (résultat exact par le théorême de Mermin-Wagner).

On peut légitimement se poser la question du modèle et de la théorie à adopter afin de rendre compte des résultats expérimentaux de transport de spins dans les solides magnétiques. Cependant, il ressort des remarques précédentes qu'il est difficile de croire qu'une même théorie, et qu'un même modèle soit capable de rendre compte des différents résultats rencontrés dans la littérature. Nous avons choisi pour chacun des cas étudiés, d'adapter notre modèle en fonction de l'étude réalisée, et de comparer qualitativement ou quantitativement les matériaux qui ont retenu notre attention, en adaptant notre modèle le plus fidèlement possible aux articles expérimentaux. Ajoutons que nous n'avons pas étudié les régions de basses températures avec un modèle de Heisenberg suivant un comportement de rsistivité en T^2 typique des magnons. La diffusion des électrons par les magnons a cependant déjà été bien étudié. Comme nous le verrons plus loin, la priorité du travail s'est portée sur l'étude des mécanismes de diffusion autour des transitions magnétiques.

3.2 Choix des simulations Monte Carlo

La méthode Monte Carlo a été un recours d'une grande efficacité dans des domaines aussi variés que la physique, la biologie, l'économie, ... Elle représente une méthode alternative pour de nombreux problèmes ne connaissant pour l'heure aucune solution analytique. Le regain d'intérêt pour les thématiques de transport de spin suite à la découverte de la magnétorésistance géante, et plus généralement au développement de la spintronique nécessite une conpréhension fine des mécanismes de propagation des électrons dans la matière et de leurs interactions avec le réseau. Les méthodes d'investigation actuelles sur le sujet reposent pour la plupart sur l'utilisation de l'espace réciproque pour décrire les propriétés de transport. Ces théories font appel à un électron en interaction avec un potentiel périodique représenté par des bandes d'énergies. Son interaction avec les autres électrons du sytème, avec les phonons, les impuretés et d'autres objets susceptibles d'affecter les propriétés de transport sont alors placés dans la masse effective des électrons. Cette méthode est particulièrement bien adaptée, puisque l'électron peut ainsi être traité comme un électron libre de masse effective m^*. Ce type de représentation n'est valable que dans le cas de petits vecteurs d'ondes dans la zone de bande parabolique. La résolution à d'autres points de la bande devient complexe. Le traitement de la dynamique du réseau seul utilise également le réseau réciproque pour décrire les magnons. Cependant, dès que le système n'est plus homogène, c'est-à-dire en présence d'impuretés, de défauts, de surfaces magnétiques, ..., l'invariance par translation est brisée, et ces défauts peuvent donner lieu à des modes localisés que cette théorie rend complexe à analyser.

Qu'en est-il de la littérature actuelle sur le traitement des problématiques de transport par le biais de la méthodes Monte Carlo ? Et bien l'utilisation de cette méthode reste encore marginale. Ce fait s'explique sans doute pour deux raisons. Premièrement, le regain d'intérêt récent concernant les problèmes liés au transport de spin, deuxièmement, les méthodes Monte Carlo en physique de la matière condensée sont généralement utilisées pour des problèmes sur réseau. Les modèles hors réseau quant à eux, sont relativement lourds à mettre en place et nécessitent de grandes ressources informatiques, et de longs temps de calcul. Contrairement à d'autres méthodes numériques, l'optimisation par la parallélisation des algorithmes de calcul n'est pas impossible mais reste compliquée. Des travaux réalisés à ce jour nous pouvons citer l'article de Sen et al. [128] et Alvarez et al. [5]. Curieusement, aucune méthode Monte Carlo de transport hors réseau n'a été exploitée par d'autres groupes à ce jour.

Notre modèle est construit dans le but d'être aussi général que possible, afin de traiter une grande diversité de matériaux. Nous avons exclu l'utilisation du champ moyen afin de tenir compte des fluctuations locales qui jouent un rôle primordial sur les propriétés de transport autour de la transition. Nous ne souhaitons pas traiter les électrons par la théorie des bandes d'énergie qui suppose de nombreuses approximations. Nous n'avons pas souhaité supposer un mécanisme quelconque pour le calcul de la résistivité, ni supposer une forme quelconque de la résistivité. Il nous semble pertinent de construire un modèle basé sur un jeu d'interactions entre spins, doué d'une dynamique stochastique permettant au système d'évoluer par lui-même dans le temps en fonction de ses interactions.

3.2.1 Principe de la méthode Monte Carlo

La simulation Monte Carlo pour les systèmes à l'équilibre repose sur l'exploration heuristique de l'espace des états d'un système (de taille fini). Par générations successives avec une chaîne de Markov, la méthode tend à approcher et reproduire numériquement les états d'équilibre du système étudié et, une fois cet équilibre atteint, de calculer les valeurs moyennes des différentes grandeurs physiques. Plus grand sera le nombre d'états visités, et plus faible sera l'erreur de calcul. Cependant, pour de grands systèmes (c'est-à-dire pour des systèmes comportant un grand nombre de particules), il devient impossible de visiter l'ensemble des états en générant des configurations au hasard. Il est donc nécessaire d'appliquer une méthode d'échantillonage de l'espace des configurations afin de rendre le temps de calcul accessible.

Considérons par exemple la mise en œuvre dans l'ensemble canonique. A l'équilibre thermodynamique, chaque configuration $\mathcal{C}_i$ est observée avec la probabilité $P(\mathcal{C}_i)$ (Eq. 1.52). Comme nous l'avons déjà précisé, il est impossible de calculer toutes les probabilités car le nombre de configurations est astronomique. Supposons donc que l'on choisisse les configurations $\mathcal{C}_i$ selon une loi d'échantillonage $f(\mathcal{C}_i)$. Lors du tirage de N configurations, chaque configuration apparaîtra en moyenne avec une occurence $Nf(\mathcal{C}_i)$. La valeur moyenne $\langle A \rangle$ est donc approchée par :

$$\langle A \rangle \sim \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{A(\mathcal{C}_i)P(\mathcal{C}_i)}{Nf(\mathcal{C}_i)} + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \tag{3.1}$$

Le choix le plus judicieux de la fonction d'échantillonage est de poser $f(\mathcal{C}_i) = P(\mathcal{C}_i)$, ainsi $\langle A \rangle$ est approché par une moyenne arithmétique :

$$\langle A \rangle \sim \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} A(\mathcal{C}_i) + O\left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\right) \tag{3.2}$$

A ce point, le problème consiste donc à générer l'échantillonnage défini par $P(\mathcal{C}_i)$. Cette loi n'est évidemment toujours pas connue à cause de la fonction de partition dans Eq. 1.52. La solution de ce problème a été proposée par Métropolis et al. dans les années 1950 [87], et consiste à générer une dynamique stochastique markovienne entre deux configurations successives du système. L'équation d'évolution est donnée par l'équation maîtresse suivante :

$$P(i, t + dt) = P(i, t) + \sum_j \left(W(j \to i)P(j, t) - W(i \to j)P(i, t)\right) \tag{3.3}$$

Au temps $t = 0$, la configuration initiale est générée aléatoirement donc hors équilibre. La dynamique pilotant l'évolution du système vers l'équilibre se traduit alors tel que, la probabilité d'un état $\mathcal{C}_i$ à l'instant $t + dt$, sera déterminé par cette même probabilité au temps t, majoré des probabilités de passer de tous les états du système vers $\mathcal{C}_i$, moins celles de passer de $\mathcal{C}_i$ vers tous les autres états. Autrement dit, chaque état dépend explicitement des états précédents et sont liés par la probabilité de transition, ou matrice de transition $W(i \to j)$ de passer d'une configuration $\mathcal{C}_i$ vers une configuration $\mathcal{C}_j$. L'ordre dans lequel se succèdent les états n'a aucune importance, la matrice de transition est

stochastique et $\sum_j W(i \to j)$=1.

L'échantillonage souhaité sera donc réalisé si la chaîne converge vers la distribution d'équilibre $P(\mathcal{C}_i)$. Cela sera le cas si $W(i \to j)$ vérifie l'équation du bilan détaillé (Eq. 3.3). C'est-à-dire que le nombre d'états quittant $\mathcal{C}_i$ doit être égal au nombre d'états arrivant à l'état $\mathcal{C}_i$. Cette condition impose qu'une fois l'équilibre atteint, cet équilibre ne sera pas détruit. Une solution particulière de l'équation d'évolution peut être choisie tel que :

$$P(j)W(j \to i) \quad = \quad P(i)W(i \to j) \tag{3.4}$$

que l'on peut écrire sous la forme :

$$e^{-\beta E(\mathcal{C}_j)}W(j \to i) \quad = \quad e^{-\beta E(\mathcal{C}_i)}W(i \to j) \tag{3.5}$$

Il n'est donc pas nécessaire de connaître la fonction de partition $\mathcal{Z}$ pour choisir les probabilités de transition $W(i \to j)$. C'est ce point qui donne l'intérêt des simulations Monte Carlo.
Notons que le processus stochastique élémentaire dans un algorithme Monte Carlo est la succession de deux étapes :

1 A partir d'une configuration $\mathcal{C}_i$, on tire au hasard une configuration $\mathcal{C}_j$, avec une probabilité $\alpha(i \to j)$.
2 Cette nouvelle configuration est acceptée avec une probabilité $\prod(i \to j)$.

$$W(i \to j) \quad = \quad \alpha(i \to j) \prod(i \to j) \tag{3.6}$$

Dans l'algorithme original de Métropolis on prend $\alpha(i \to j) = \alpha(j \to i)$, ainsi :

$$\frac{W(i \to j)}{W(j \to i)} \quad = \quad \frac{\prod(i \to j)}{\prod(j \to i)} = e^{-\beta(E(\mathcal{C}_j)-E(\mathcal{C}_i))} \tag{3.7}$$

La solution proposée par Métropolis et al. [87] est :

$$W(i \to j) \quad = \quad \begin{cases} e^{-\beta(E(\mathcal{C}_j)-E(\mathcal{C}_i))} & \text{si} \qquad E(\mathcal{C}_j) > E(\mathcal{C}_i) \\ 1 & \text{si} \qquad E(\mathcal{C}_j) \leq E(\mathcal{C}_i) \end{cases} \tag{3.8}$$

Cela revient à dire que que si $E(\mathcal{C}_j) < E(\mathcal{C}_i)$ la transition est acceptée, dans le cas contraire la transition est acceptée avec la probabilité $W(i \to j)$. **Notons que la température intervient dans l'algorithme de Métropolis par le biais de la constante de Boltzmann $\beta = (k_B T)^{-1}$ (cf. Eq. 3.8)**.

3.3 Procédure et dynamique Monte Carlo sur réseau

Modèle de spin d'Ising

Numériquement, notre démarche va consister dans un premier temps à construire une structure cristalline sur laquelle nous appliquons un modèle de spin (Ising, Heinsenberg, XY). Prenons pour commencer l'exemple du modèle d'Ising [29][23]. Ce modèle à deux

états de spin $S = \pm 1$, est très utilisé en physique statistique, car il permet de réduire la complexité du système.

Avec le modèle d'Ising, nous supposons que les sites du réseau cristallin sont occupés par des dipoles magnétiques qui ne peuvent prendre que deux valeurs : $S = \pm 1$ sur l'axe z. Chaque spin interagit avec ses voisins à travers une interaction d'échange J. L'interaction J est une fonction monotone, décroissante et fonction de la distance entre spins voisins. Pour simplifier, la portée des interactions est limitée aux premiers voisins. Enfin, le signe de J détermine le type de magnétisme du réseau. Supposons le Hamiltonien 3.9 en champ nul ($B = 0$). Si $J > 0$, l'énergie du réseau est minimum en configuration ferromagnétique. A l'inverse, si $J < 0$, le réseau adoptera un état fondamental antiferromagnétique.

$$\mathcal{H}_i = -J \sum_{i \neq j} S_i S_j - B \sum_i S_i \tag{3.9}$$

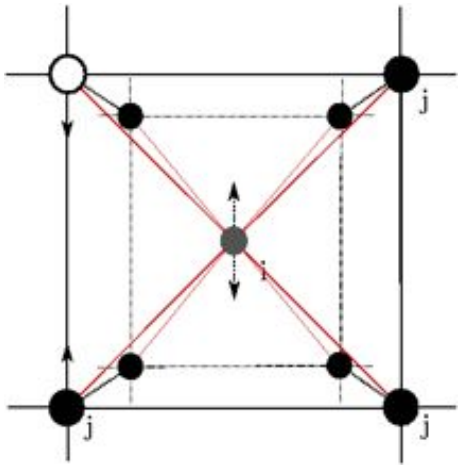

FIGURE 3.1 – *Représentation d'une maille BCC (cubique centré). Le site i interagit avec les sites j premiers voisins (lignes rouges). Les sites noirs représentent des spins sur réseau orientés up et les site blancs les spins du réseau orientés down.*

En premier lieu, nous générons un état particulier du réseau à une température T donnée. L'état initial que nous générons n'est pas nécessairement à l'équilibre thermique. Comme nous venons de le voir, c'est la dynamique stochastique utilisée dans la simulation qui va permettre de faire converger le système vers un état d'équilibre. Ainsi, nous commençons par thermaliser le réseau par une succession (d'essais) de retournement de chaque spin du réseau. Pour chaque spin, l'énergie est calculée comme la somme des interactions avec ses premiers voisins (cf. Eq. 3.9 & Fig. 3.1). Le retournement d'un spin est alors pondéré par la solution Métropolis (Eq. 3.8). Lorsque tous les spins du réseau ont été visités une fois, on dit que le programme a réalisé un pas Monte Carlo sur réseau. Pour atteindre l'équilibre, nous réalisons un grand nombre de pas Monte Carlo, typiquement de l'ordre de 10^6 pas. Ce nombre de pas peut être fixé par le suivi d'une grandeur telle que l'énergie en fonction du temps (cf. Fig. 3.2).
Ces résultats sont issus d'une simulation sur un réseau FCC (réseau cubique à faces centrées), de taille $100a \times 100a \times 100a$ où a est le paramètre de maille du réseau (pour

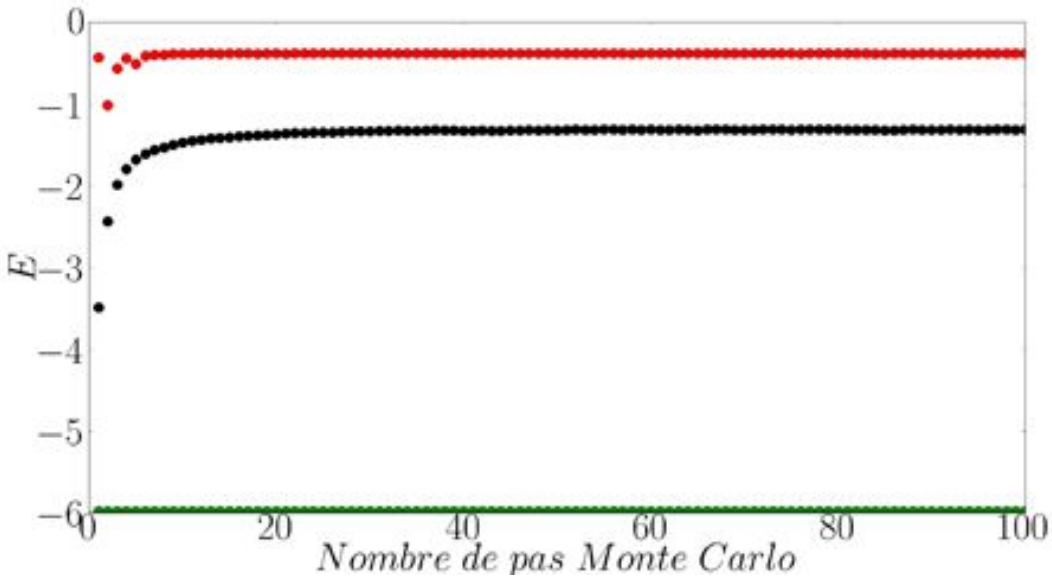

FIGURE 3.2 – *Energie par spin d'une réseau FCC en fonction du temps (pas) Monte Carlo. La courbe verte correspond à $T \ll T_c$, la courbe noire à $T \sim T_c$, la courbe rouge à $T \gg T_c$. Pour chaque courbe, nous partons d'un état initial ferromagnétique (état fondamental de la structure), l'énergie est calculée comme la somme des interactions entre spins premiers voisins, l'énergie de l'état fondamental est $E = -6$.*

donner un ordre de grandeur, cette structure est un cube d'environ $40nm$ de côté). Nous choisissons comme configuration initiale un état purement ferromagnétique. A très basse température, le réseau est donc dans son état d'équilibre dès le premier pas, l'énergie reste constante. Pour les deux autres courbes, on remarque un régime transitoire lors les premiers pas Monte Carlo, suivi d'une saturation de l'énergie correspondant à l'état d'équilibre du système. Le temps nécessaire à l'établissement de l'équilibre thermodynamique dépend de la température. A basse température, le système converge rapidement, à haute température un plus grand nombre de pas est nécessaire.

Une fois le système à l'équilibre, nous réalisons les moyennes des observables du réseau. Comme nous l'avons déjà décrit, nous calculons l'aimantation M, l'énergie interne E, la chaleur spécifique C_v ainsi que la susceptibilité magnétique χ par le biais de la physique statistique, (Fig. 3.3).

L'obtention d'une bonne statistique lors d'une simulation Monte Carlo est conditionnée par la visite d'un maximum d'états de l'espace des phases. Nous réalisons donc plusieurs séries de moyennes sur réseau lors d'une même simulation. Entre chaque séquence de moyennes, nous rethermalisons le réseau afin d'obtenir des états d'équilibre non corrélés. A l'approche de la température de transition, les observables thermodynamiques présentent de grandes fluctuations et possèdent toutes les échelles de longueurs possibles. Ces fluctuations ralentissent la dynamique markovienne et induisent ce qu'on appelle "ralentissement critique" ("critical slowing down"), le temps de corrélation augmente notablement. Afin d'éviter des erreurs superflues dues à ce phénomène, il est nécessaire de rethermaliser un grand nombre pas pour obtenir des états d'équilibre non-corrélés. Pour une quantité A

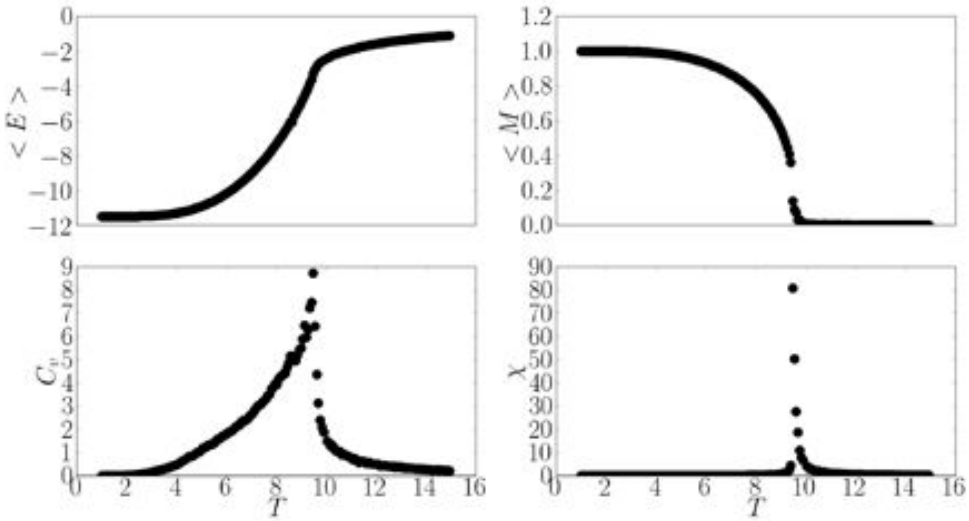

FIGURE 3.3 – *Aimantation M, énergie interne E, capacité calorifique C_v et susceptibilité χ, moyennées par simulation Monte Carlo, en fonction de la température.*

la fonction d'autocorrélation s'écrit [23][18] :

$$\phi(t) = \int [A(t') - < A >] [A(t+t') - < A >] \, dt' \tag{3.10}$$

$$= \int \left[A(t')A(t+t') - < A >^2\right] dt' \tag{3.11}$$

où $A(t')$ est la valeur instantanée de A et $< A >$ sa valeur moyenne. La discrétisation de cette intégrale se reformule tel que :

$$\phi(t) = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} A(t')A(t+t') - \frac{1}{t_{max} - t} \left[\sum_{t'=0}^{t_{max}-t} A(t') \sum_{t'=0}^{t_{max}-t} A(t+t') \right] \tag{3.12}$$

Lorsque la fonction ϕ s'annule, les états sont décorrélés. Dans nos simulations, le nombre de pas Monte Carlo utilisés pour passer d'un état à un autre est de l'ordre de 500.
Le calcul des valeurs moyennes des observables se résume donc à sommer les grandeurs sur toutes les configurations visitées.

$$< M > = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle$$

$$< E > = \left\langle J \sum_{i \neq j} S_i . S_j - B \sum_i S_i \right\rangle$$

$$< C_v > = \frac{\partial E}{\partial T} = -k_B \frac{\beta^2}{N} \left(< E^2 > - < E >^2 \right)$$

$$< \chi > = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\beta}{N} \left(< M^2 > - < M >^2 \right)$$

Modèles de spin de Heisenberg et XY

Le changement de modèle de spin ne pose pas de problème majeur du point de vue de l'algorithme. Dans le cas du modèle de Heisenberg, les spins ont trois degrés de liberté, l'équation 3.9 se réécrit tel que :

$$\mathcal{H}_i = -J\sum_{i\neq j}\vec{S}_i.\vec{S}_j - \sum_i \vec{B}.\vec{S}_i - D^z\sum_i S_i^{z^2} \tag{3.13}$$

$$= -J\sum_{i\neq j}\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z\right) - \sum_i \vec{B}.\vec{S}_i - D^z\sum_i S_i^{z^2} \tag{3.14}$$

La dernière somme du Hamiltonien 3.16 correspond au terme d'anisotropie uniaxiale le long de l'axe z. On remarque que dans la limite des très grandes anisotropies avec $D^z > 0$, le système se comporte comme avec le modèle d'Ising.

Dans le cas du modèle XY, les spins bougent dans le plan XY car ils n'ont pas de composante sur l'axe z :

$$\mathcal{H}_i = -J\sum_{i\neq j}\vec{S}_i.\vec{S}_j - \sum_i \vec{B}.\vec{S}_i \tag{3.15}$$

$$= -J\sum_{i\neq j}\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\right) - \sum_i \vec{B}.\vec{S}_i \tag{3.16}$$

Dans beaucoup de cas pour permettre le passage entre les spins de Heisenberg et XY, le Hamiltonien du cas XY peut alors s'écrire comme le Hamiltonien de Heisenberg dans la limite d'une très forte anisotropie avec $D^z < 0$.
A titre d'exemple, nous présentons l'effet de la température sur un réseau FCC ferromagnétique dans Fig. 7.2 dans le cas du modèle d'Ising.

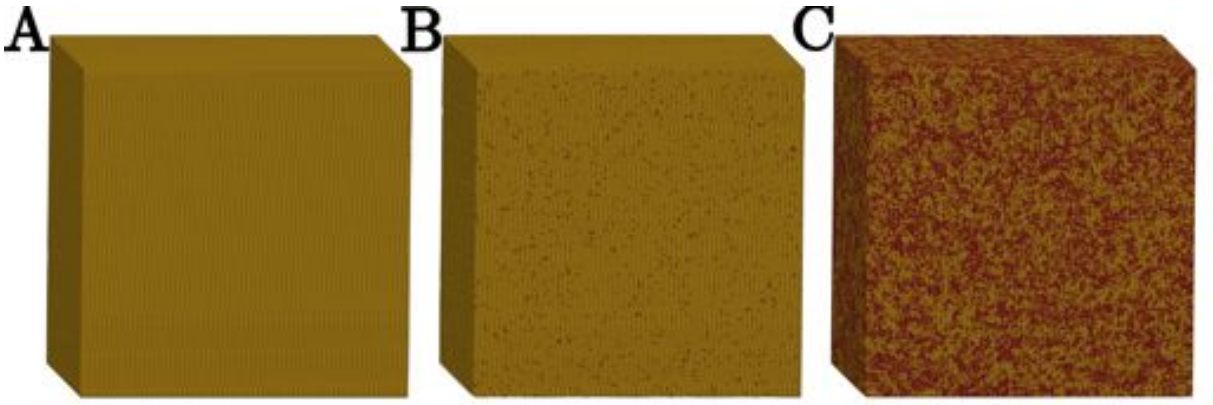

FIGURE 3.4 – *Structure FCC ferromagnétique avec spins d'Ising : A.* $T/J(=1) \ll T_c/J$, *B.* $T/J(=5) < T_c/J$, *C.* $T/J(=20) \gg T_c/J$ *sur une structure de taille :* $N_x = 100a$, $N_y = 100a$, $N_z = 100a$. *Les sites de couleur jaune font référence aux spins* $\uparrow$, *les sites de couleur rouge aux spins* $\downarrow$.

A basse température ($T/J(=1) \ll T_c/J$), le système est à l'équilibre dans l'état ferromagnétique, le cristale est parfaitement ordonné, (Fig. 7.2A). Une augmentation de la

température ($T/J(=5) < T_c/J$), à pour effet d'introduire un léger désordre et se manifeste par le retournement de quelques spins du réseau, (Fig.7.2B). Enfin, l'application d'une forte température ($T/J(=20) \gg T_c/J$), détruit l'ordre magnétique et fait basculer le système dans un état désordonné, la phase paramagnétique (fig :7.2.C).
Notre problématique va consister à comprendre comment la résistance magnétique évolue en fonction de la température, et d'extraire de nos simulations les mécanismes de diffusions à l'origine de cette résistance.

La seconde phase de notre procédure de simulation concerne le transport de spin, à partir duquel nous calculerons des grandeurs telles que la résistance magnétique et le temps de relaxation des électrons de conduction traversant un système magnétique. Cette seconde phase est décrite dans le paragraphe suivant (cf. 3.4).
Comme nous l'avons présenté dans le chapitre précédent, il existe beaucoup de sources de diffusion électronique : les phonons, les défauts cristallin, l'ordre magnétique des spins du réseau,... **Dans ce manuscrit, nous nous concentrons uniquement sur l'effet d'ordre magnétique du réseau sur la diffusion des spins itinérants, source de diffusion dominante dans les semiconducteurs magnétiques**. La diffusion par les phonons ne sera pas traitée dans ce manuscrit pour deux raisons, le temps de calcul deviendrait beaucoup trop important, et les théories les traitent déjà ce comportement de façon efficace.

3.4 Procédure et dynamique de transport de spin : Monte Carlo hors réseau

Une fois le réseau à l'équilibre thermodynamique, on y injecte aléatoirement N_0 spins itinérants. La plupart du temps nous choisissons $N_0 < N_x \times N_y \times N_z \sim 10^{23} cm^{-3}$, soit moins d'un électron par maille du réseau. Cette densité est un peu plus forte par rapport à la densité d'électrons que l'on trouve dans les semiconducteurs réels : $\sim 10^{15} - 10^{18}$ cm^{-3}. Cependant, étant donné que nous travaillons sur un échantillon de taille finie, nous avons besoin d'une bonne moyenne statistique. En plus, l'interaction entre les électrons est très faible (ou nulle) par rapport à leur interaction avec les spins du réseau, ce qui fait qu'une densité d'électrons itinérants plus forte n'affecte pas l'effet de l'ordre magnétique du réseau.

Dans notre modèle, les spins itinérants peuvent avoir plusieurs sources d'interaction avec leur environnement :

- Interaction spins itinérants avec les spins des ions sur réseau. Il s'agit de l'interaction qui permet de comprendre la résistivité d'un matériau magnétique.

- Interaction entre spin itinérants. C'est l'interaction entre les électrons itinérants qui est quasi nulle pour un métal (électrons libres ou quasi libres), et très faible pour un semiconducteur.

- Un terme de diffusion modélisé par un gradient de concentration qui va permettre aux électrons de ne pas former de clusters dans le cas d'une interaction attractive entre eux, et qui va permettre une distribution spatiale assez uniforme dans le

régime de transport stationnaire. Le terme que nous utilisons correspond au premier terme du développement du potentiel chimique autour de l'équilibre.

Un champ électrique est appliqué le long de l'axe x afin de générer un courant électrique et de calculer la résistance magnétique. Nous ajouterons éventuellement un champ magnétique dans la direction des spins, et parallèlement au champ électrique dans le but de ne pas faire intervenir la force de Lorentz, et de simplifier le mouvement des électrons.

Procédure et algorithme

Pour commencer, il est nécessaire de thermaliser le réseau afin d'amener la dynamique de transport dans un état d'équilibre du réseau.
La procédure de transport est la suivante : A un instant t, on sélectionne un spin itinérant au point r. Les interactions de ce spin avec son environnement vont nous permettre de calculer son énergie au point (t, r). On tire alors aléatoirement une nouvelle position $(t', r^{'})$, à laquelle nous calculons la nouvelle énergie du spin. Le déplacement de r en $r^{'}$ de l'électron est alors accepté ou refusé par l'algorithme de Métropolis (cf. figure 3.5). Distinguons deux cas :

- Si le déplacement est accepté, l'électron passe du point (t, r) à $(t + 1, r^{'})$.

- Si le déplacement est refusé, l'électron reste à sa position à l'instant suivant, c'est-à-dire de (t, r) à $(t + 1, r)$.

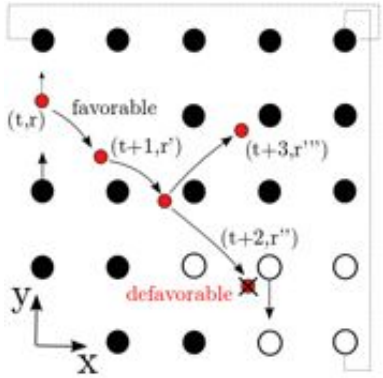

FIGURE 3.5 – *Dynamique de déplacement d'un électron (en rouge) à travers un réseau de spin (spins "up" en noir, spins "down "en blanc)*

On reproduit cette procédure sur tous les électrons (ce que l'on appelle un pas Monte Carlo sur le transport) un très grand nombre de fois.
La dynamique stationnaire atteinte, les électrons se propagent sous l'effet du champ électrique appliqué, nous calculons alors le nombre d'électrons traversant des "surfaces de comptage" par unité de temps afin d'obtenir le courant et la résistance magnétique du matériaux, Eq. 3.6. Les surfaces de comptage sont disposées perpendiculairement au champ électrique. La première surface est placée en $N_x/4$, la seconde en $N_x/2$, la troisième

en $3N_x/4$ (cf. Fig. 3.6). La résistance adimensionnée est définie tel que :

$$R = \frac{1}{n} \tag{3.17}$$

avec n le nombre moyen de spins itinérants traversant les surfaces de comptage.

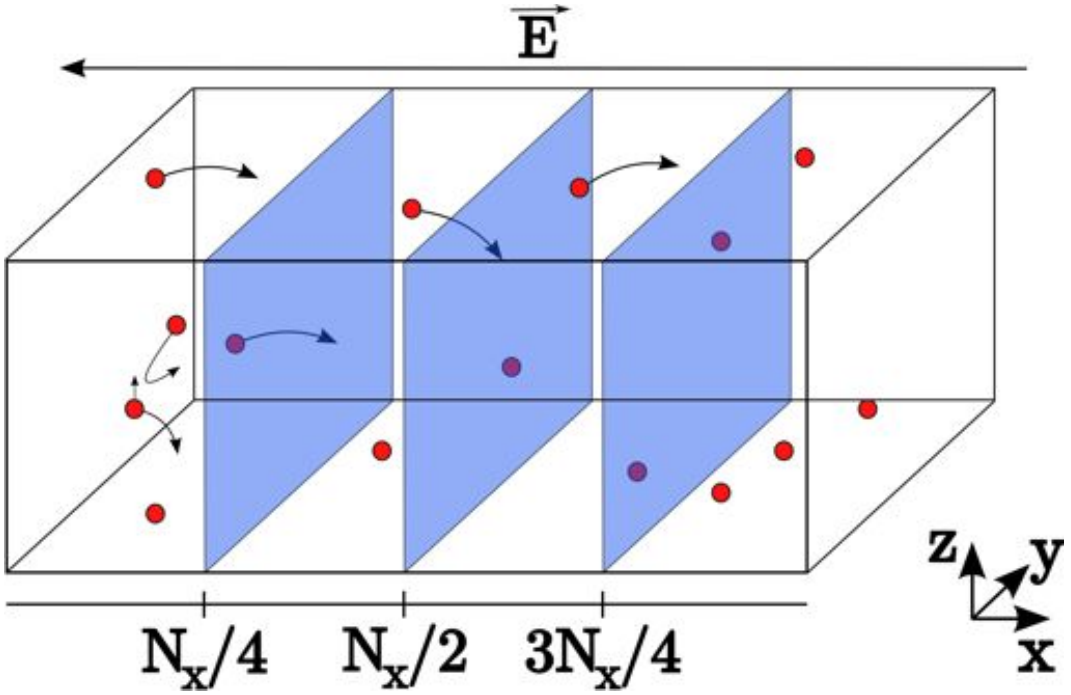

FIGURE 3.6 – *Schéma de mesure de la résistance d'une boîte de simulation de dimension $N_x \times N_y \times N_z$. La résistance est mesurée comme la somme des électrons (en rouge) traversant les trois parois de comptage (en bleu) par unité de temps.*

Afin de s'assurer de la bonne qualité statistique de nos mesures, nous utlisons la procédure suivante. Le régime stationnaire atteint, nous calculons le courant sur une durée de N_1 pas Monte Carlo de transport. Entre deux phases de transport, nous rethermalisasons le réseau afin d'amener ce dernier d'un état d'équilibre à un autre état décorrélé du précédent. Ce temps de rethermalisation est fixé à N_2 pas Monte Carlo sur réseau. Cette procédure sera répétée N_3 fois. Nous appelons cette procédure le multimoyennage. Cette méthode nous permet de réduire les fluctuations statistiques sur les mesures et ainsi d'acroître la qualité statistique des résultats.
Les paramètres N_2 et N_3 nous assurent une qualité statistique des résultats qui sera d'autant meilleure que ces deux paramètres sont grands. En effet, N_2 et N_3 correspondent aux nombres d'états de l'espace des phases visités. Par contre, N_1 représente le temps Monte Carlo pendant lequel un électron se déplace à travers un réseau dans un état d'équilibre thermodynamique. Une question se pose : Combien de temps l'électron doit-il se déplacer à travers un même état magnétique à une température donnée ? Cette question est importante car elle relie le temps de relaxation τ_L du réseau par rapport à celui de l'électron τ_I. Afin de fixer ce problème, nous utilisons l'équation de dépendance en température à τ_L. Cette relation dans le cas des systèmes non-frustrés s'écrit [72][110] :

$$\tau_L = \frac{A}{\left|1 - \frac{T}{T_c}\right|^{z\nu}} \tag{3.18}$$

où A est une constante, ν l'exposant critique de corrélation, et z l'exposant dynamique. A la limite des $T \to T_c$ le temps de relaxation du réseau diverge. Autour de la température de transition T_c, le système rencontre une zone de ralentissement critique qui rend extrêmement long le temps de relaxation des spins du réseau. Dans cette gamme de températures, les électrons se déplacent très longuement dans une même configuration d'équilibre, contrairement aux autres gammes de températures dans lesquelles le systèmes évolue à chaque déplacement des électrons. Nous rediscuterons en détail les effets du temps de relaxation un peu plus tard.

Pour des raisons de temps de calcul, nous limitons **la densité d'électrons** à un (ou moins d'un) électron par maille du réseau. Nous privilégions de **fortes interactions entre spins itinérants et spins du réseau** comme c'est le cas pour les semiconducteurs, afin de mettre en évidence l'effet d'ordre magnétique du cristal sur les propriétés de transport, notamment le pic de résistance à T_c. Ces deux conditions justifient que nous traitions les électrons comme un gaz dans un état ferromagnétique. Même si à température finie une partie des spins itinérants s'inversent, les simulations que nous avons réalisées avec la possibilité de retournement des spins de conduction (électrons non-polarisés), ne montrent pas de différences significatives avec les simulations dont les spins itinérants sont polarisés. Nous utiliserons donc dans la plus part de nos simulations des **électrons polarisés**. Enfin le transport s'effectue dans des **structures de tailles finies**. Nous reviendrons en détail sur l'ensemble de ces points dans le chapitre suivant.

Pour conclure cette description sommaire de notre modèle, un certain nombre de questions se posent quant à la méthode de simulation. En effet, la simulation Monte Carlo est une méthode itérative discrète. Aussi, le déplacement des électrons dans l'espace réel ne se fait pas de façon continue mais par sauts successifs. Le temps Monte Carlo est également discrétisé. Ce problème de limite continue force à s'intérroger sur trois points en particulier :

1. Quel est l'impact de la discrétisation (espace/temps) sur les résultats de simulations ?

2. Comment choisir la longueur maximum de sauts des électrons ?

3. Comment définir le temps Monte Carlo ?

1. Les moyennes des observables thermodynamiques réalisées en physique statistique ont un sens purement statistique, et sont définies sur l'ensemble des états accessibles au système. Ces états peuvent être générés tous à l'instant t, la moyenne d'une observable sur ces états est appelée "moyenne d'ensemble". Maintenant, si ces mêmes états apparaissent successivement au cours du temps, la moyenne effectuée avec l'évolution du temps ("moyenne temporelle") revient à moyenner sur les mêmes états que dans la moyenne d'ensemble. Donc, en principe les moyennes calculées de deux manières sont les mêmes. Le système est dit "ergodique". Notons qu'en pratique, on ne peut générer tous les états pour réaliser la moyenne d'ensemble, ni simuler sur un temps infini en ce qui concerne la moyenne temporelle. Ces deux types de moyenne peuvent être différents. On appelle à tort une telle situation "systemes non-ergodiques". Existent-ils réellement dans la na-

ture ou résultent-ils juste des défauts de moyennage ? Revenons à l'effet de discrétisation. Imaginons que nous réussissons à générer tous les états des électrons, c'est-à-dire nous réussissons à placer les électrons dans toutes les positions possibles, la moyenne sur ces états donnera un résultat exact quelle que soit la méthode utilisée pour générer ces états. En réalité, nous n'avons qu'une partie de ces états : s'ils sont représentatifs (états les plus probables), la moyenne réalisée n'est pas "mauvaise". La discrétisation du mouvement et du temps n'affecte pas les résultats à partir du moment ou les états générés sont suffisamment nombreux et représentatifs dans un sens "probabiliste".

2. La longueur de saut l (analogue à la vitesse v dans nos simulations avec le temps pris comme unité de temps Monte Carlo), est tirée aléatoirement de façon équiprobable dans un ensemble $l \in [0; l_{max}]$ où l_{max} représente la distance entre premiers voisins du réseau cristallin. Ce choix satisfait à deux contraintes liées à la discrétisation du modèle : premièrement le temps de calcul qui est un point critique lors des simulations hors réseau, deuxièmement la bonne visite de l'espace cristallin.
Concrètement, imaginons que nous prenions un pas moyen de déplacement l_0 petit devant la distance premier voisin. Dans ce cas, un grand nombre de déplacements sont nécessaires afin que les électrons visitent l'ensemble du système. Localement, d'une itération à l'autre, l'environnement ne change pas dans la plupart des tentatives de mise à jour des positions des électrons. Un grand nombre d'itérations Monte Carlo sur le transport est dans ce cas nécessaire pour faire évoluer le système. A l'inverse, imaginons que l_0 soit très grand devant la distance entre premiers voisins sur réseau. Dans ce cas, les électrons peuvent sauter des zones de réseau sans être affectés par des clusters magnétiques locaux du système. Dans ce cas, l'espace cristallin ne peut être correctement visité. C'est pourquoi nous avons choisi de fixer la distance maximum de saut comme la distance minimum séparant deux spins du réseau.

3. Nous avons défini un pas de temps Monte Carlo comme le balayage complet du système. C'est-à-dire que toutes les particules soient visitées une fois. Dans le cas des systèmes ergodiques, la discrétisation du temps n'a pas d'effet sur les résultats dans la mesure ou l'espace des phases est bien exploré. On peut cependant se poser une question sur l'évolution du temps physique d'un pas Monte Carlo en fonction des conditions thermodynamiques du système. Il est admis dans les simulations Monte Carlo de considérer ce temps comme un paramètre qui ne peut être traduit en unité de temps réel que par la comparaison avec l'expérience.

3.5 Algorithme du programme Monte Carlo

La mise en œuvre de notre algorithme a été réalisée comme présenté sur la figure 4.2. L'algorithme est construit à l'intérieur d'une boucle de température. Nous cherchons dans le cadre de notre travail à étudier l'évolution d'observables en fonction de la température. Pour une température donnée, on commence par générer un réseau cristallin (sans électrons itinérants), dans un état que nous choisissons généralement comme l'état fondamental du système. Ceci a pour but d'optimiser le temps calcul, car il est plus facile de converger vers l'équilibre thermodynamique depuis l'état fondamental qu'inversement. On thermalise ensuite le réseau sur un grand nombre de pas Monte Carlo $\sim 10^6$. Une fois l'équilibre atteint, on calcule les observables du réseau : l'énergie interne, l'aimantation, la chaleur spécifique, la suceptibilité magnétique. Cette première mesure réalisée, nous faisons évoluer le système sur une dizaine de pas Monte Carlo, et nous réalisons une seconde mesure des observables. Cette procédure est répétée un grand nombre de fois $\sim 10^5$. Nous moyennons les observables sur un grand nombre d'états de l'espace des phases, nous assurant ainsi une bonne qualité statistique des grandeurs mesurées.
On injecte N_0 électrons itinérants que nous thermalisons afin d'atteindre une dynamique de transport stationnaire. L'équilibre atteint, nous calculons les observables de transport : résistance magnétique, temps de relaxation, ... Comme pour la moyenne des observables du réseau, nous réalisons nos mesures sur un grand nombre d'états $\sim 10^4$, en alternant les calculs de transport par des rethermalisations du réseau, afin de tenir compte d'un nombre maximal de configurations des spins du réseau, et de s'assurer de la bonne exploration de l'espace des phases.

3.6 Description des différentes interactions du modèle

Donnons maintenant une description détaillée des interactions que nous allons utiliser dans nos simulations. Dans de nombreux cas présentés dans ce document, nous utiliserons le modèle d'Ising afin de simplifier les situations réelles, tout en conservant les ingrédients principaux du problème. La première hypothèse consiste à placer sur les sites du réseau des spins en interaction qui seront responsables de l'état ferromagnétique ou antiferromagnétique du réseau. La seconde approximation va consister à ne faire interagir les spins du réseau qu'avec leurs premiers voisins, en considérant les effets quantiques comme négligeables [5]. Dans le cas des films minces, nous appliquons sur la structure des conditions périodiques sur les axes x et y, et des conditions de réflexion miroir sur l'axe z. Ces conditions périodiques tendent à simuler une structure de longueur infinie le long des axes x et y. Ne pas appliquer de conditions périodiques sur z revient à simuler l'effet de couches minces. Pour le transport, les conditions périodiques assurent aux électrons itinérants arrivant à un bout de la structure d'être réintroduits à l'autre bout, afin de conserver le nombre de particules de la boîte.

Les spins du réseau interagissent avec leurs premiers voisins par le Hamiltonien :

$$\mathcal{H}_i = -J \sum_{i \neq j} \vec{S}_i . \vec{S}_j \tag{3.19}$$

avec $\vec{S}_i$ un spin d'Ising au site i dont les interactions sont sommées avec les spins $\vec{S}_j$ de ses premiers voisins. J représente l'interaction d'échange qui déterminera le type de

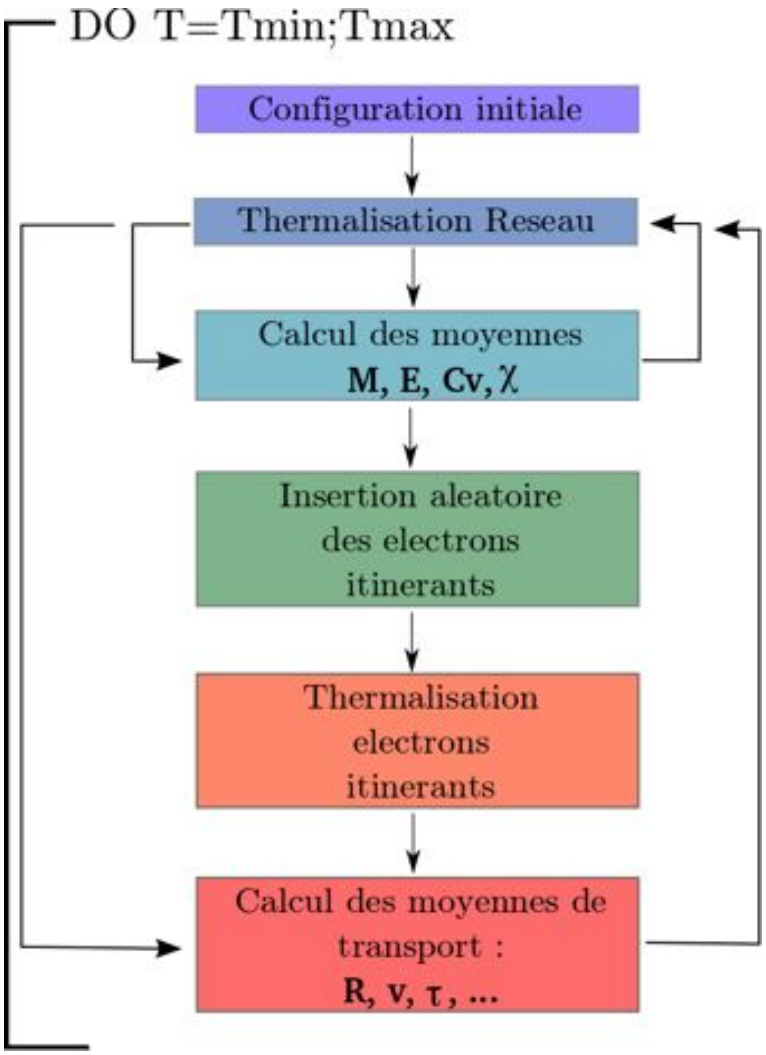

FIGURE 3.7 – *Algorithme Monte Carlo pour le transport de spin*

magnétisme du réseau, ferromagnétique si $J > 0$, antiferromagnétique si $J < 0$.

L'interaction entre les spins du réseau et les spins itinérants est donnée par :

$$\mathcal{H}_{e-i} = -\sum_{i \neq j} I_{i,j} \vec{\sigma}_i . \vec{S}_j \quad \text{avec} \quad I_{i,j} = I_0 e^{-r_{i,j}} \tag{3.20}$$

dans lequel $\vec{\sigma}_i$ représente le spin de l'électron itinérant i, $\vec{S}_j$ le spin de l'ion j du réseau. L'interaction $I_{i,j}$ décroissante et monotone fonction de la distance $r_{i,j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ entre spins itinérants et spins du réseau. La somme entre spins est limitée par une sphère de rayon D_1 centrée autour de la position $\vec{r}_i$ de l'électron. Nous donnons une forme exponentiellement décroissante à $I_{i,j}$, la forme de cette interaction n'est pas très importante car nos interactions sont toujours limitées à courtes portées. Cependant l'interaction est calibrée tel que l'énergie d'interaction d'un spin itinérant avec le réseau soit du même ordre de grandeur que les interactions des spins premiers voisins du réseau.

L'interaction entre les spins itinérants est donnée par :

$$\mathcal{H}_{e-e} = -\sum_{i \neq j} K_{i,j} \vec{\sigma}_i . \vec{\sigma}_j \quad \text{avec} \quad K_{i,j} = K_0 e^{-r_{i,j}} \tag{3.21}$$

dans lequel $\vec{\sigma}_i$ représente le spin de l'électron itinérant i, $\vec{\sigma}_j$ les spins des électrons j compris dans une sphère de rayon D_2 centrée autour de la position $\vec{r}_i$. L'interaction $K_{i,j}$ décroît de façon monotone avec la distance $r_{i,j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ séparant deux spins itinérants.

FIGURE 3.8 – A gauche : *Schéma d'interaction d'un électron (en rouge) avec les ions du réseau (en noir) à l'intérieur d'une sphère de rayon D_1 centrée autour de l'électron.* A droite : *Schéma d'interaction d'un électron (en rouge) avec les autres électrons (en rouge) à l'intérieur d'une sphère de rayon D_2 centrée autour de l'électron.*

Un champ électrique $\vec{E}$ est appliqué le long de la direction x. Son énergie est donnée par :

$$\mathcal{H}_E = -e \sum_i \vec{E} . \vec{r}_i \tag{3.22}$$

Un terme de potentiel chimique dépendant de la concentration de spins itinérants localisés à l'intérieur de la sphère de rayon D_2 :

$$\mathcal{H}_c = D \sum_i (n(\vec{r}_i) - n_0) \tag{3.23}$$

où $n(\vec{r})$ représente la densité d'électrons itinérants et n_0 la densité moyenne de spins dans le système. On fixera D de telle sorte qu'à l'équilibre, le terme de potentiel chimique compense le terme d'interaction entre spins itinérants. En effet, il est crucial de porter une attention particulière à ce terme, car la polarisation des spins itinérants et leurs couplages ferromagnétiques, terme $\mathcal{H}_{e-e}$ donné par 3.21, ont tendance à les agglomérer pour minimiser leur énergie : en l'absence du terme 3.23, les électrons itinérants d'un gaz de spins sans champ électrique appliqué, vont par les seules interactions électron-électron former des grappes. Le terme 3.23 provient ainsi du second principe de la thermodynamique, et tend à équilibrer toutes les zones de l'espace vers un même potentiel chimique par le transfert de particules des zones les plus denses de l'espace, vers les zones les moins denses. Comme nous l'avons déjà souligné, ce dernier terme d'interaction correspond au développement limité à l'ordre un du potentiel chimique près de l'équilibre.

Chapitre

4 Résistance magnétique dans des films minces magnétiques

4.1 Films minces ferromagnétiques

4.1.1 Introduction

La résistivité des semiconducteurs magnétiques est étudiée de façon générale par des approches théoriques et expérimentales depuis une soixantaine d'années. Les précédents travaux réalisés sur ces matériaux soulignent un comportement singulier de leurs résistivités en comparaison de celles des métaux. En effet, à la température de transition ordre/désordre magnétique (ferromagnétique, antiferromagnétique/paramagnétique), la résistance présente une "anomalie" : un "pic" de résistance, alors que les métaux magnétiques présentent deux types de résistances, avec ou sans pic à T_c (cf. figure 4.1).

Ce comportement singulier a fait émerger l'idée d'une nouvelle source de diffusion dans certain solide, la diffusion magnétique. Rappelons brièvement ici les modèles historiques présentés dans le chapitre 2. Dès la fin des années 1950, les travaux identifient le rôle joué par l'orientation des spins itinérants en interactions avec l'ordre des spins du réseau [53][54]. A basse température, la principale source de diffusion est attribuée aux ondes de spin [111] avec lesquelles la résistivité varie en T^2. Cependant, à haute température cette théorie n'est plus valide. De Gennes et Friedel sont les premiers à avancer une explication en 1958 [24]. Ils pensent que le comportement de résistivité à proximité de la température de Curie (T_c) est une conséquence de la corrélation des spins du réseau. Ils suggèrent donc que la résistivité magnétique doit se comporter comme la suceptibilité magnétique. L'anomalie de résistance est dans un premier temps attribuée aux fluctuations à longues portées de l'aimantation autour de la région critique. Par la suite d'autres auteurs ont attribué le pic de résistance aux corrélations à courtes portées autour de $T \geq T_c$. En particulier Fisher et Langer [39] qui ont montré que la forme du pic de résistance dépend de la portée des interactions. Par la suite, d'autres auteurs ont effectué des travaux reposant sur l'utilisation de la corrélation entre spins du réseau. Parmi les travaux les plus intéressants que nous venons de présenter, nous pouvons citer celui de Haas [46], qui utilise la théorie des perturbations comme probabilité de diffusion introduite dans l'équation de Boltzmann. Dans cet article, Haas étudie les résistances de semiconducteurs ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Il conclut que le pic de résistance n'est présent que dans le cas des semiconducteurs ferromagnétiques, contrairement aux semiconducteurs antiferromagnétiques dont seul la dérivée dR/dT exhibe un pic. Récemment, le travail de Zarand [126] sur les semiconducteurs dilués attribue la hauteur du pic de résistance à la localisation des spins itinérants par les impuretés magnétiques dans le réseau. Depuis une dizaine d'années, la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) dans les systèmes à multicouches

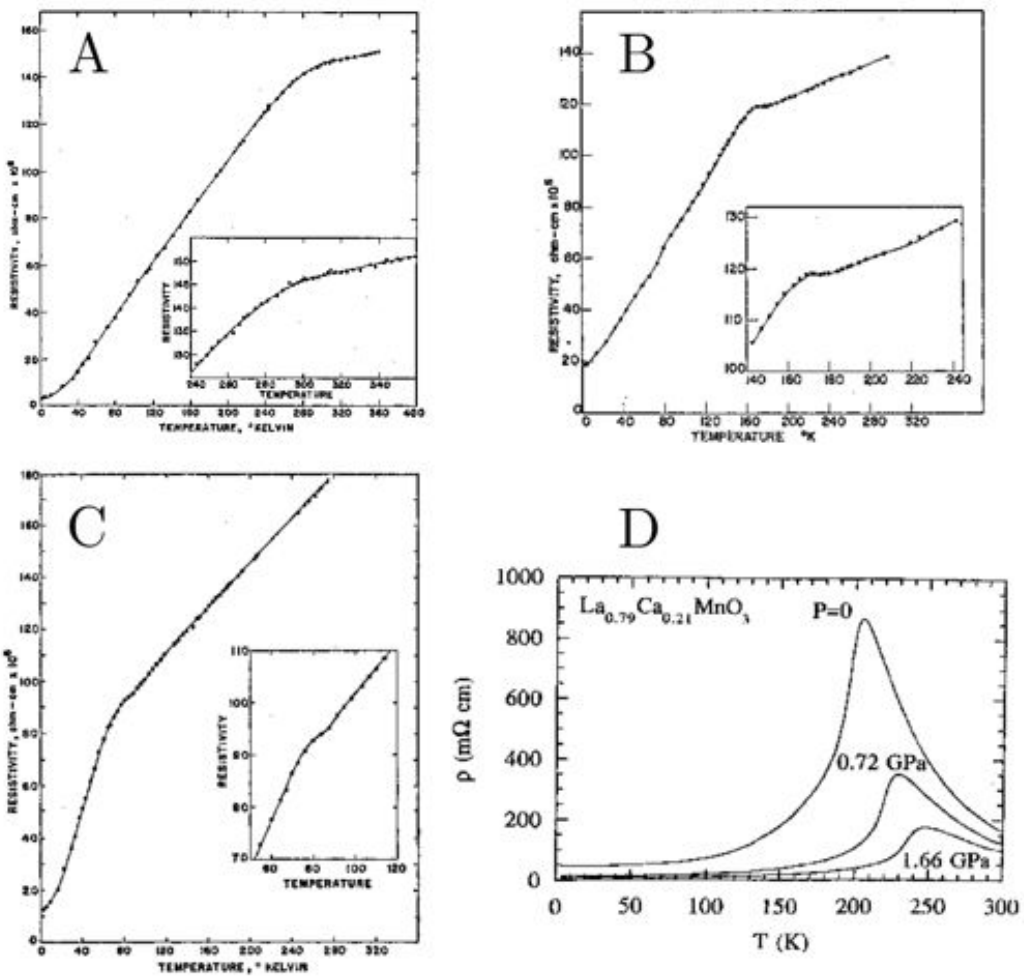

FIGURE 4.1 – *A-B-C : courbes de résistances en fonction de la température pour les métaux magnétiques purs de gadolinium (A), dysprosium (B), erbium (C). Ces courbes sont tirées de l'article de S. Legvold [59], les insets sont des grossissements réalisés autour de la température critique. D : courbe de résistance d'un semiconducteur magnétique* $La_{1-x}Ca_xMnO_3$*, tirée de l'article de J. J. Neumeier et al. [86].*

magnétiques [10][38][15], ainsi que la naissance de la spintronique relancent l'interêt des questions liées à l'influence du magnétisme sur le transport de spin.
Dans ce chapitre nous présentons dans un premier temps nos résultats Monte Carlo de transport dans un film mince ferromagnétique. Nous utilisons le modèle d'Ising afin de décrire l'influence de l'ordre magnétique et la dynamique du réseau sur les propriétés de transport. Nous décrirons l'influence des différentes conditions initiales, l'action de chacun des termes d'interaction décrits précédemment sur les mécanismes de diffusion. Dans un second temps, nous étendrons l'étude du transport à un matériau antiferromagnétique, nous discuterons la forme de la résistance dans le cas antiferromagnétique, et comparerons nos résultats aux prédictions faites par Haas, ainsi que le phénomène de localisation autour de la température de transition décrit par Zarand.

4.1.2 Interprétation de la courbe de résistance magnétique en fonction de la température

Nous utilisons pour réaliser les mesures de transport, un film mince semiconducteur ferromagnétique en configuration cubique à faces centrées (FCC). La structure possède deux surfaces symétriques (001) en interaction avec le vide. Des conditions périodiques sont appliquées le long des axes x et y, l'axe z ne bénéficie pas de conditions périodiques dans le but de simuler une dynamique de spins similaire à celle rencontrée dans les films minces. Le nombre total de cellules de la structure est de $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 8a$ en unité de paramètre de maille a. Chaque spin est localisé sur un site du réseau, et interagit avec ses premiers voisins par le biais du Hamiltonien $\mathcal{H}_i$ donné par 3.19.

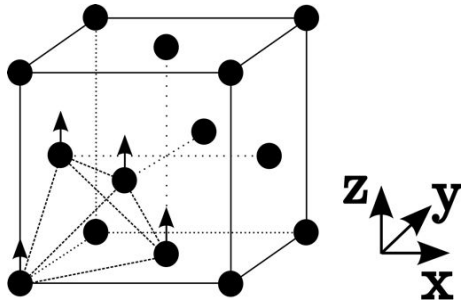

FIGURE 4.2 – *Maille élémentaire d'un cristal cubique à faces centrées FCC.*

Avant de réaliser des mesures de transport, il est nécessaire de déterminer la température critique T_c séparant la phase ferromagnétique de la phase paramagnétique. Une première étape de simulation est effectuée sans électrons itinérants. Nous amenons le réseau à l'équilibre thermique et réalisons les moyennes des observables du réseau. **Les paramètres d'entrées que nous choisissons sont adimentionnés afin de simplifier la présentation**. Nous fixons les valeurs de spin sur réseau $S = \pm 1$ avec une intégrale d'échange $J = 1$. Nous présentons sur la figure 4.3 l'aimantation renormalisée du réseau en fonction de la température. Nous déterminons ainsi la température critique adimensionnée, $T_c/J = 9.58$ ($k_B = 1$).
La thermalisation du réseau a été réalisée sur 10^6 pas Monte Carlo. Suite à cette thermalisation, les mesures des différentes observables du réseau sont effectuées 10^5 fois. Chaque mesure est séparée par une rapide phase de rethermalisation de 10 pas Monte Carlo.

La seconde phase de simulation correspond au transport. Le réseau à l'équilibre, nous injectons N_0 spins itinérants dans le système. Les électrons se déplacent le long du champ électrique E_x en interaction avec leur environnement local. Les différents termes du Hamiltonien de l'électron sont donnés par les expressions suivantes $\mathcal{H}_{e-i}$ interaction électrons-réseau : 3.20, $\mathcal{H}_{e-e}$ interaction électron-électron : 3.21, $\mathcal{H}_E$ interaction avec le champ électrique : 3.22 et $\mathcal{H}_c$ le gradient de concentration : 3.23. Les conditions périodiques du système assurent une bonne homogénéité des électrons à l'intérieur du réseau en régime stationnaire.

La simulation se déroule comme nous l'avons décrit dans le chapitre précédent : pour une température donnée, nous calculons l'énergie d'un électron i à une position $\vec{r}_i$ de

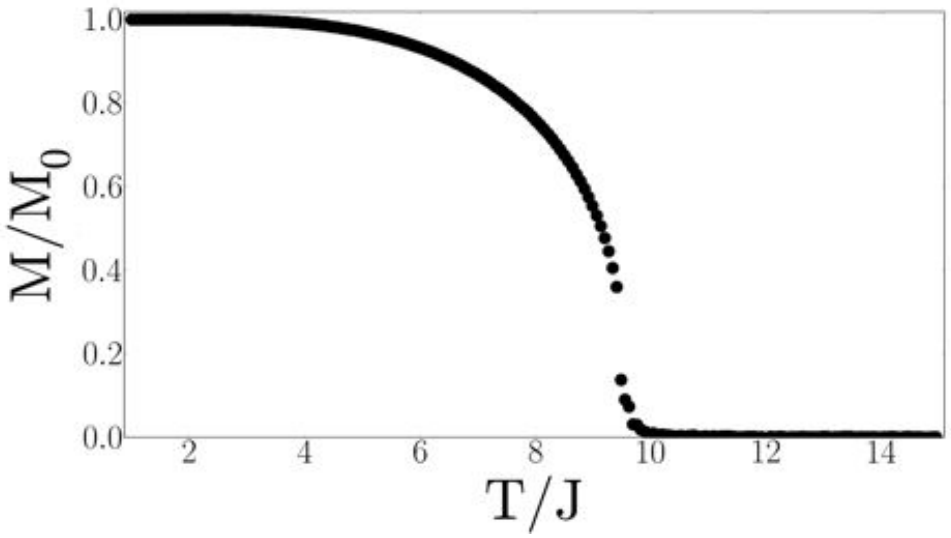

FIGURE 4.3 – *Aimantation renormalisée du cristal FCC ferromagnétique en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 8a$, $J = 1$.

l'espace réel, en prenant en compte l'ensemble des interactions décrites précédemment. Nous tentons de déplacer aléatoirement cet électron à une nouvelle position. La longueur des sauts est limitée à la distance entre premiers voisins du réseau. Si l'électron i tombe dans une sphère de rayon Δ_0 centrée sur un ion ou un électron voisin de i, le déplacement à cette nouvelle position est immédiatement annulé, et un nouveau tirage est effectué. Cette zone "interdite" modélise le principe d'exclusion de Pauli. Dans le cas ou le nouveau tirage ne retombe pas dans une zone d'exclusion, le déplacement est accepté ou rejeté par l'algorithme de Métropolis [87].

Rappelons que pour chaque température, le temps de thermalisation permettant d'atteindre le régime stationnaire est fixé à 10^4 pas Monte Carlo de transport. Chaque phase de calcul du transport a lieu pendant N_1 pas Monte Carlo, où N_1 est fixé par l'expression du temps de relaxation, Eq. 3.18. Deux phases de calcul du transport sont séparées par une rethermalisation du réseau de $N_2 = 10^2$ pas Monte Carlo sur réseau. Cette procédure est répétée $N_3 = 10^4$ fois. Cette méthode de multimoyennage nous permet de réduire les fluctuations statistiques sur les mesures. En guise d'illustration, nous pouvons voir une comparaison des mesures de résistivités sans (Fig. 4.4), et avec multimoyennage (Fig. 4.5).

Interprétation de la courbe de résistance magnétique :

Commenons par décrire et analyser les différents comportements de diffusion derrière la courbe de résistivité.

Les paramètres de transport sont les suivants : Les spins itinérants sont polarisés $\sigma = 1$, les constantes d'interaction électron-réseau et électron-électron sont respectivement fixées à $I_0 = K_0 = 0.5$, la constante du terme de diffusion est $D = 0.5$. Nous fixons le nombre d'électrons à $N_0 = 8 \times 20^2$, une densité correspondant à un électron par cellule. Le rayon

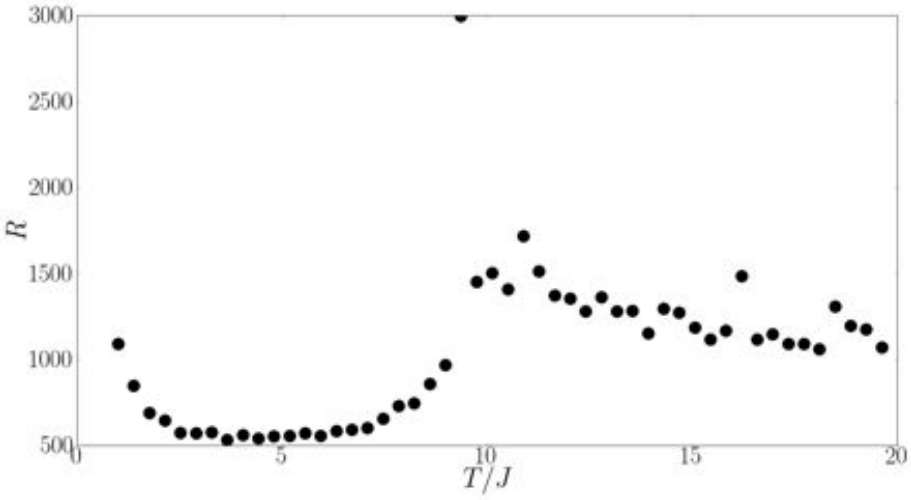

FIGURE 4.4 – *Résistance magnétique calculée sans méthode de multimoyennage en unités arbitraires en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8$, $J = 1$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = 1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $E = 1$.

de la sphère d'exclusion est $\Delta_0 = 0.05a$ avec a le paramètre de maille du réseau. Les rayons des sphères d'interaction électron-réseau et électron-électron sont choisis à $D_1 = D_2 = a$. La longueur de saut $|\vec{l}| \in [0; \sqrt{2}a/2]$. Le champ électrique est fixé à $E = 1$, enfin nous fixons les constantes de l'expression du temps de relaxation du réseau de la relation 3.18 à $A = 1$, avec les exposants critiques de corrélation et de dynamique $\nu = 0.638$ et $z = 2.02$ connus pour le modèle d'Ising à trois dimensions [72][110].

Ce jeu de paramètres a été choisi en respectant les critères physiques suivants :

- I_0 est choisi tel que l'énergie d'interaction E_{e-i} d'un spin itinérant avec les spins voisins du réseau soit du même ordre de grandeur que l'énergie d'interaction des spins du réseau. Ce choix d'interactions fortes correspond plus ou moins au régime de transport rencontré dans les semiconducteurs.

- K_0 est choisi tel que l'énergie d'interaction entre spins itinérants soit inférieure à E_{e-i} afin de faire ressortir l'effet de l'ordre magnétique sur les observables de transport.

- D est choisi afin d'éviter la formation de grappes de spins itinérants. D dépend en général des valeurs de I_0, K_0, D_1 et D_2.

- E est choisi de façon à ne pas être trop dominant pour ne pas masquer les effets des fluctuations thermiques et de l'ordre magnétique.

- La densité d'électrons est fixée à un électron par maille, une densité d'électrons assez forte pour les semiconducteurs, notamment $MnTe$ sur lequel nous nous concentrerons dans le chapitre suivant, mais ceci n'a pas d'importance lorsque l'interaction entre les électrons itinérants est faible. Une forte densité permet d'améliorer les

moyennes statistiques sur les états des électrons. Précisons que nous excluons dans notre étude le cas des semiconducteurs dilués (DMS) dans lesquels le magnétisme du réseau est induit par le fort dopage ($\sim 5.10^{20} cm^{-3}$). Dans nos simulations, les spins itinérants ne polarisent pas le réseau. Ces systèmes seront traités dans des travaux ultérieurs.

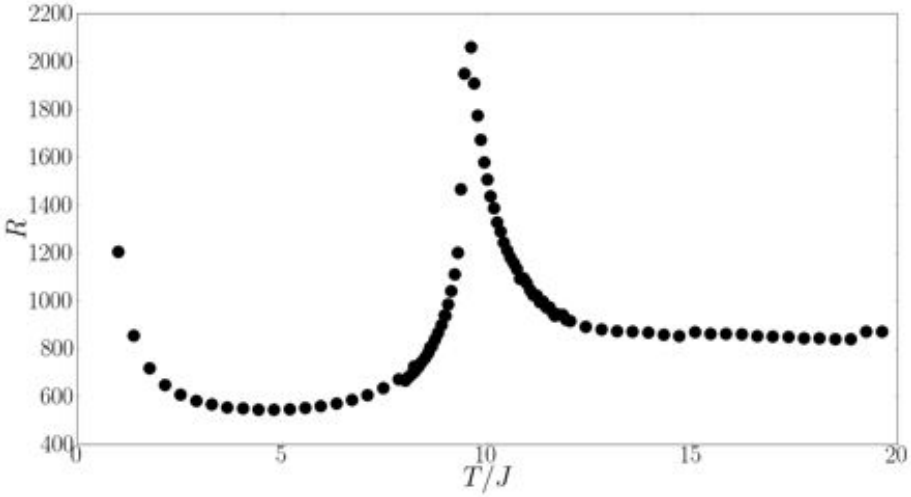

FIGURE 4.5 – *Résistance magnétique calculée avec la méthode de multimoyennage en unités arbitraires et en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $J = 1$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$.

1. Comme nous pouvons le constater, la méthode de multimoyennage permet de supprimer les fluctuations observées sur la figure 4.4.

2. A basse température, la résistance augmente dans le sens des températures décroissantes.

3. A la température de transition T_c, la résistance exhibe un pic.

4. Après T_c, la résistance décroît dans le sens des températures croissantes, et devient constante à une valeur de saturation.

2. Interprétation du comportement de résistance à basse température :

A très basse température, nous observons que la résistance augmente fortement lorsque T décroît. L'origine de ce comportement provient du gel des électrons, piégés par les positions d'énergie minimale du réseau. Plaçons la structure à $T = 0.5$. A cette température, l'énergie thermique est trop faible pour retourner un spin du réseau, le système revêt un ordre ferromagnétique presque parfait. Les électrons se propagent dans le réseau et "ressentent" un potentiel périodique, comportant des minimums d'énergie. La dynamique de transport durant la phase de thermalisation va conduire les spins itinérants vers ces minimums afin de minimiser l'énergie du système. La faible densité N_0 des spins itinérants ($\sim$

1 électron par cellule), conjuguée à l'effet du gradient de diffusion qui tend à homogénéiser spatialement la densité d'électrons, vont conduire chaque spin de conduction dans l'un des puits du réseau.
Nous avons calculé le paysage énergétique en faisant circuler un électron dans le potentiel périodique pour mesurer l'énergie ressentie en chaque point de l'espace réel. Ce paysage est présenté sur la figure 4.6, avec les conditions initiales données précédemment. Les électrons lors de la phase de thermalisation convergent vers les zones bleus du potentiel (basses énergies), pour y rester piégés faute d'une énergie thermique et d'un champ électrique suffisamment intense pour les en libérer.
Nous verrons un peu plus tard que l'intensité des interactions entre les spins itinérants et les spins du réseau, ainsi que les interactions entre spins itinérants sont les deux paramètres clefs qui rendent compte de la courbure et de la hauteur du pic à T_c.

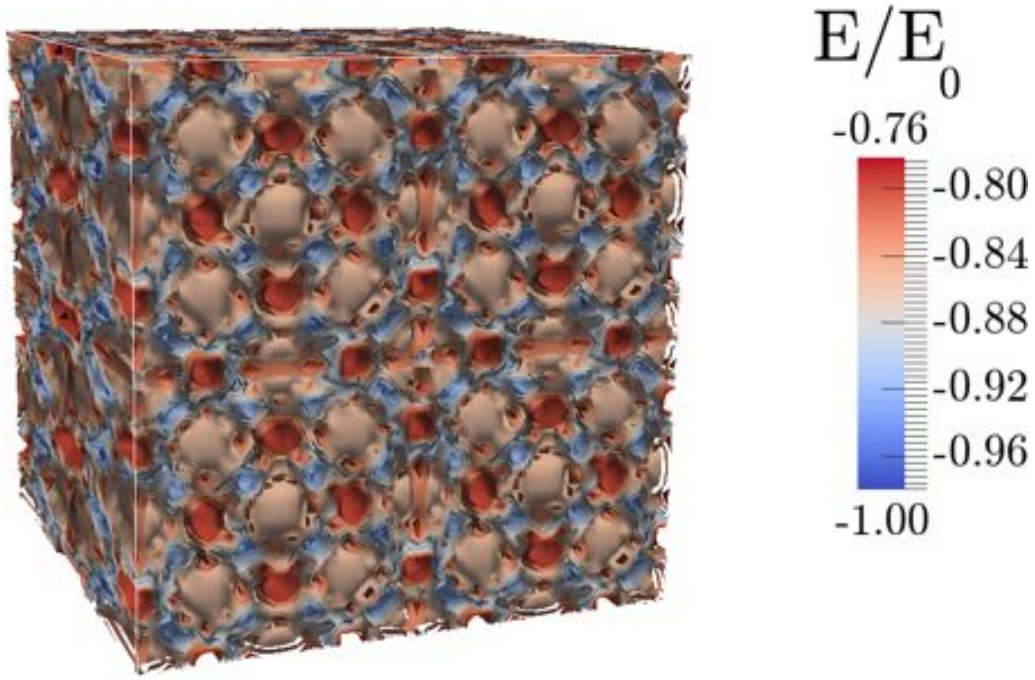

FIGURE 4.6 – *Visualisation des surfaces isoénergétique renormalisées (E_0 correspond à l'énergie minimum du système) en 3D avec application d'une nappe de couleur représentant l'intensité des énergies ressenties par un électron dans le réseau. La visualisation est extraite d'une exploration d'un bloc de $N_x \times N_y \times N_z = 4 \times 4 \times 4$ réalisée à l'intérieur d'une structure de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$ dans l'état fondamental. Les paramètres utilisés sont $D_1 = a$, $I_0 = 2$*

Afin de valider cette hypothèse, nous avons calculé la fonction de distribution radiale $g(r)$ présenté en figure 4.7. La fonction de distribution radiale consiste à réaliser une moyenne des distances $|\vec{r}_{e-e}|$ séparant chaque électron de voisins plus où moins lointains. Nous pouvons voir sur cette courbe deux pics caractéristiques d'un ordre spatiale s'étalant jusqu'à trois paramètres de maille. Ces pics nous indiquent la cristalisation des électrons à basse température à l'intérieur du réseau pour des distances premiers voisins $|\vec{r^{(1)}}_{e-e}| = a$, et

second voisins $|\vec{r^{(2)}}_{e-e}| = 3a$.

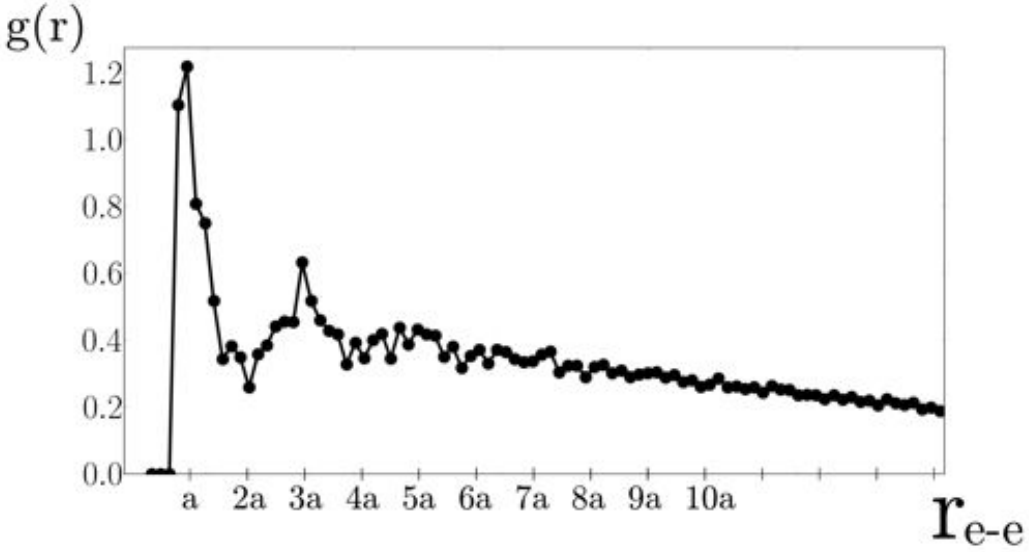

FIGURE 4.7 – *Fonction de distribution radiale $g(r)$ calculée à $T = 0.5$. Les paramètres de simulation sont $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$.*

De nombreux articles expérimentaux traitant de conduction dans des semiconducteurs magnétiques soulignent ce comportement de résistance à basse température [127][109][65][31][35][57][73][100][117].

Lorsque la température augmente, la résistance diminue. L'augmentation de la température permet de briser l'ordre ferromagnétique (up) des basses températures, et fait apparaître des sites occupés par des spins antiparallèles (down). Les électrons initialement piégés dans les puits de potentiel vont voir la profondeur de ces puits diminuer, et le champ électrique les accélérer le long de x. Lors du transport, les électrons polarisés vont rencontrer les sites antiparallèles (down) du réseau qui auront pour effet de produire la diffusion, et d'augmenter la conduction i.e. affaiblissant la résistance du solide. Plus la température augmente, et plus le nombre de sites antiparallèles (down) augmente. Nous obtenons ainsi un minimum de résistance autour de $T \sim 5$: 4.6.

3. Interprétation du comportement de résistance à la température de transition :

Au-delà de $T \sim 5$, les spins antiparallèles isolés vont se coupler ferromagnétiquement, donnant naissance à des clusters de spins down dont le nombre et la taille vont croître avec l'augmentation de la température (cf. figure 4.8). Les clusters down vont alors altérer la mobilité des spins itinérants entraînant une augmentation de la résistance, fonction de la température. A la transition, T_c, R présente un pic. Le mécanisme physique à l'origine de ce pic de résistance a été attribué dans un premier temps par Kasuya [53][54] au désordre magnétique induit par la température. Fisher, Langer [39] et Kataoka [55] ont imputé l'existence du pic de résistivité à la corrélation spin-spin à courte portée. Plus

tard Zarand propose une explication à ce comportement par l'apparition d'un phénomène de localisation des spins de conduction par les impuretés dans le réseau [126][128].

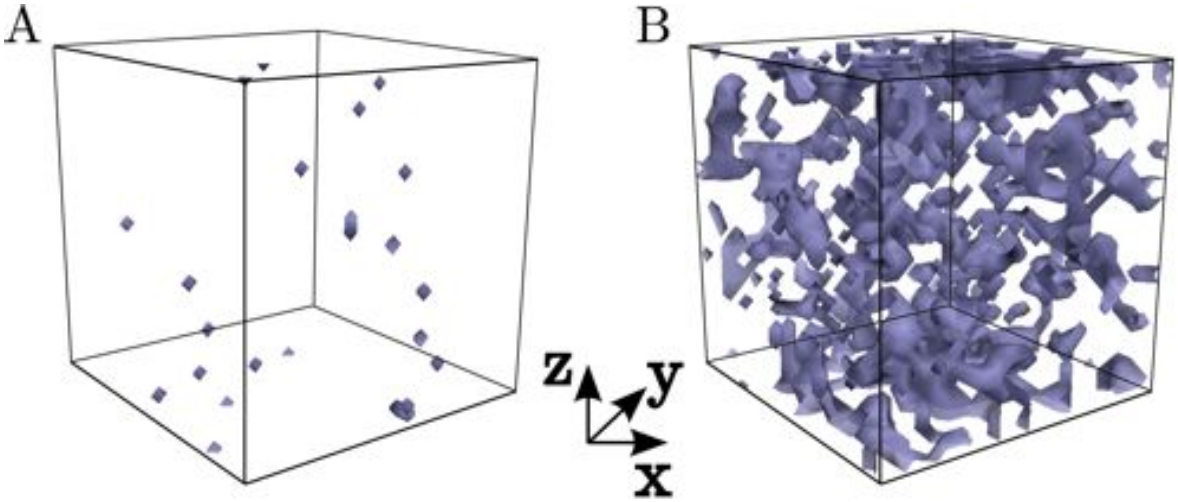

FIGURE 4.8 – *Visualisation 3D des clusters de spins down du réseau dans une structure FCC de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 10 \times 10 \times 10a$. à (A) $T = 3$, (B) $T = 9$.

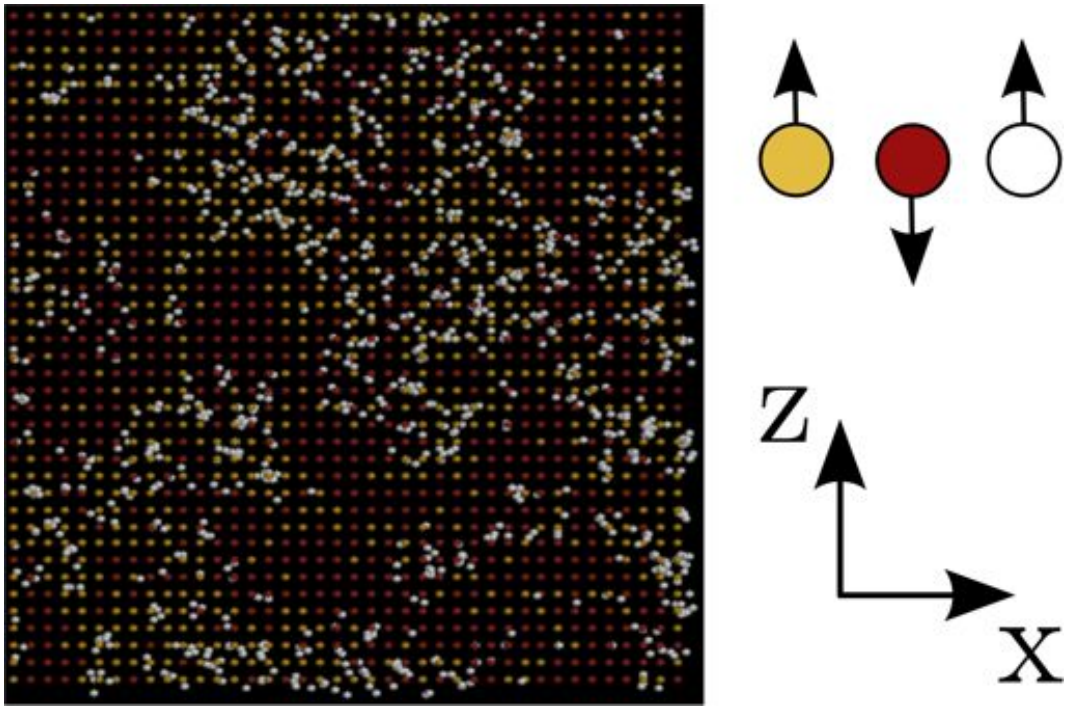

FIGURE 4.9 – *Structure FCC ferromagnétique à* $T \sim T_c$. *Sur cette visualisation les sites jaunes correspondent aux spins up, les spins down aux sites rouges. Les points blancs correspondent aux électrons itinérants polarisés up. On distingue les clusters up (down) du réseau et la localisation des spins itinérants.*

Dans le cas des simulations Monte Carlo, nous proposons notre interprétation concernant l'origine du pic de résistance : nous observons la formation de clusters up et down, dont la taille est de l'ordre de quelques paramètres de maille et qui augmente quand $T \to T_c$ [1]. L'énergie d'un électron (de spin up) à l'intérieur du cluster (de spin down) est positivement maximale, ceci empêche l'électron d'y aller. Au point de vue simulation, la grande taille des clusters, supérieures aux sauts que peuvent réaliser les électrons $|\vec{l}_{max}| = \sqrt{2}a/2$, a pour conséquence de réduire la mobilité des électrons et de provoquer une augmentation de la résistance. Il est intéressant de remarquer que lorsque la taille du cluster est petite, de l'ordre d'un ou deux spins, l'effet est inverse : l'électron peut vernir à sa proximité, grâce au champ appliqué, même avec une petite augmentation de l'énergie. Il n'y reste pas "longtemps" car il y a, aux alentours, des positions d'énergie plus basse. Ceci provoque une plus forte mobilité, comme nous l'avons souligné à $T < 5$ plus haut. Il est encore nécessaire d'apporter une précision qui va nous mener à une conclusion similaire à celle de Zarand. Bien que Zarand étudie le comportement de diffusion dans des semiconducteurs dilués (ce qui n'est pas notre cas), il souligne qu'autour de la transition, les fluctuations (temporelles) des spins connaissent un ralentissement critique à l'origine d'un phénomène de localisation des porteurs. Ce même ralentissement intervient dans notre modèle par la formation des clusters de grande taille connue dans les études des phénomènes critiques. Ce ralentissement s'exprime par l'expression 3.18. Le système percole et le paysage magnétique évolue très lentement ($\tau_L \to \infty$). Les spins itinérants (polarisés up) ont alors un temps relativement important pour se frayer un passage autour des clusters down (zones de hautes énergies), et se localiser dans des clusters up qui représentent des zones de basses énergies comme le montre la figure 4.9. La constante de couplage électron-réseau $I_0 < 0$ est ferromagnétique, les interactions entre spins parallèles sont donc favorable en énergie, au contraire les interactions antiparallèles sont défavorables.
Cette conclusion est confirmée par le calcul du temps de relaxation des électrons se propageant à travers la structure pour différentes températures (cf. Fig. 4.10). Sur cette courbe, nous distinguons un pic à la température de transition, ceci n'est pas surprenant dans la mesure où le temps de relaxation des spins itinérants est inversement proportionnel à la résistance du matériau, Eq. 1.1. Cependant, ce paramètre nous renseigne sur la dynamique temporelle des porteurs avec l'évolution de la température. Pour de faibles températures, $\tau_I \to 0$. Ceci est dû au piégeage des électrons dans les minimums d'energie locaux du réseau. A la température de transition, le temps de relaxation des spins itinérants chute, alors que le temps de relaxation τ_L augmente. Nous soulignons la corrélation entre temps de relaxation du réseau et temps entre deux collisions des porteurs. A la transition, les électrons sont d'une part freinés par la formation des clusters dont les tailles sont supérieures à la longueur de déplacement des porteurs, et d'autre part par le ralentissement critique, caractéristique du réseau dans cette gamme de température. Ces deux effets conduisent les spins de conduction à se localiser dans des zones de basses énergies (cluster up).

Une dernière visualisation permettant d'illustrer nos propos présentée en figure 4.11 consiste à comparer le trajet moyen effectué par un électron itinérant lors d'une phase de calcul du transport pour deux températures. $T = 5$ correspondant au minimum de résistance de la courbe 4.5, et $T = 9.79 \sim T_c$ correspondant au pic de résistance. A $T = 5$ nous constatons que l'électron dont nous avons suivi le parcours pendant 500 pas Monte Carlo, traverse la structure de bout en bout le long de x, sa mobilité est grande, i.e.

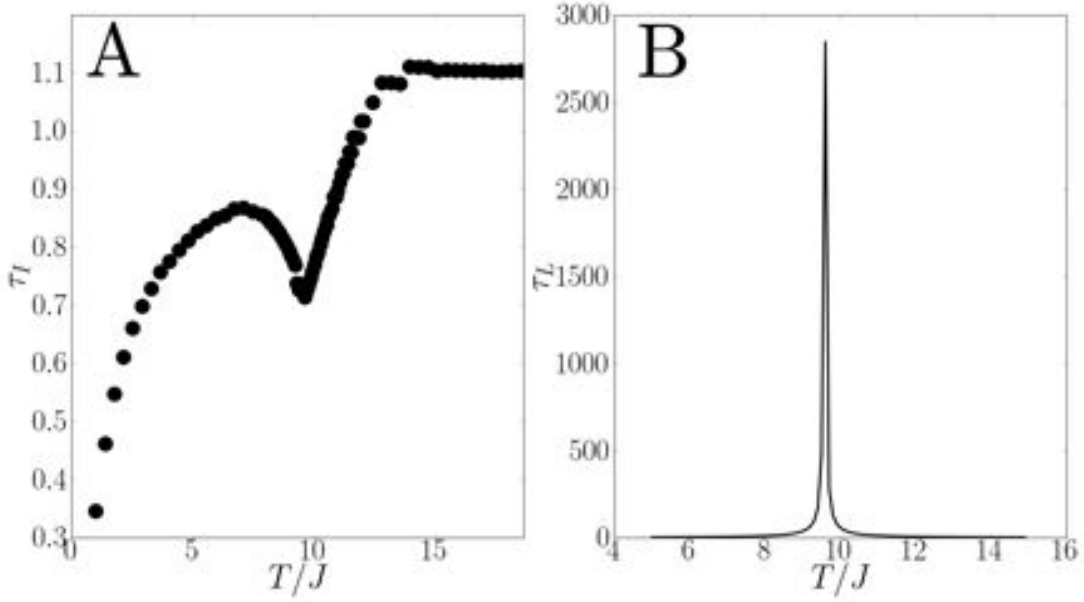

FIGURE 4.10 – A : *Temps moyen entre deux collisions d'un électron en fonction de la température.* B : *Temps de relaxation du réseau en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $I_0 = 2, K_0 = 0.5$, $E = 1$.

la résistance du matériau est faible. Pendant le même temps (500 pas Monte Carlo de transport), à $T = 9.79 \sim T_c$ nous constatons que l'électron est localisé dans une zone de l'espace qui correspond sans doute à un cluster up du réseau. Dans ce cas, la mobilité de l'électron est faible, i.e. la résistance du matériau est élevée.

4. Interprétation du comportement de résistance après la transition et à haute température :

Lorsque $T \geq T_c$, on observe une décroissance de la résistance avec l'augmentation de la température. Ceci s'explique par les arguments suivants : dans une zone proche mais supérieure à T_c, le temps de relaxation du réseau décroît, les fluctuations thermiques augmentent et les grands clusters du réseau fondent, augmentant la mobilité des électrons. Les spins itinérants sont d'autant plus mobiles que l'énergie locale du réseau est instable. Au-delà de T_c dans la phase paramagnétique, les fluctuations du réseau deviennent très importantes, à chaque déplacement les électrons voient un paysage magnétique différent. Le temps caractéristique des fluctuations du réseau est plus important que le temps caractéristique de déplacement des électrons. Les spins sont diffusés à chaque déplacement, la résistance tend vers une constante lorsque le désordre du réseau est total. **Nous rappelons que notre modèle ne tient pas compte de la contribution des phonons sur les courbes de résistances. Ceci explique pourquoi la résistance devient constante à haute température**.

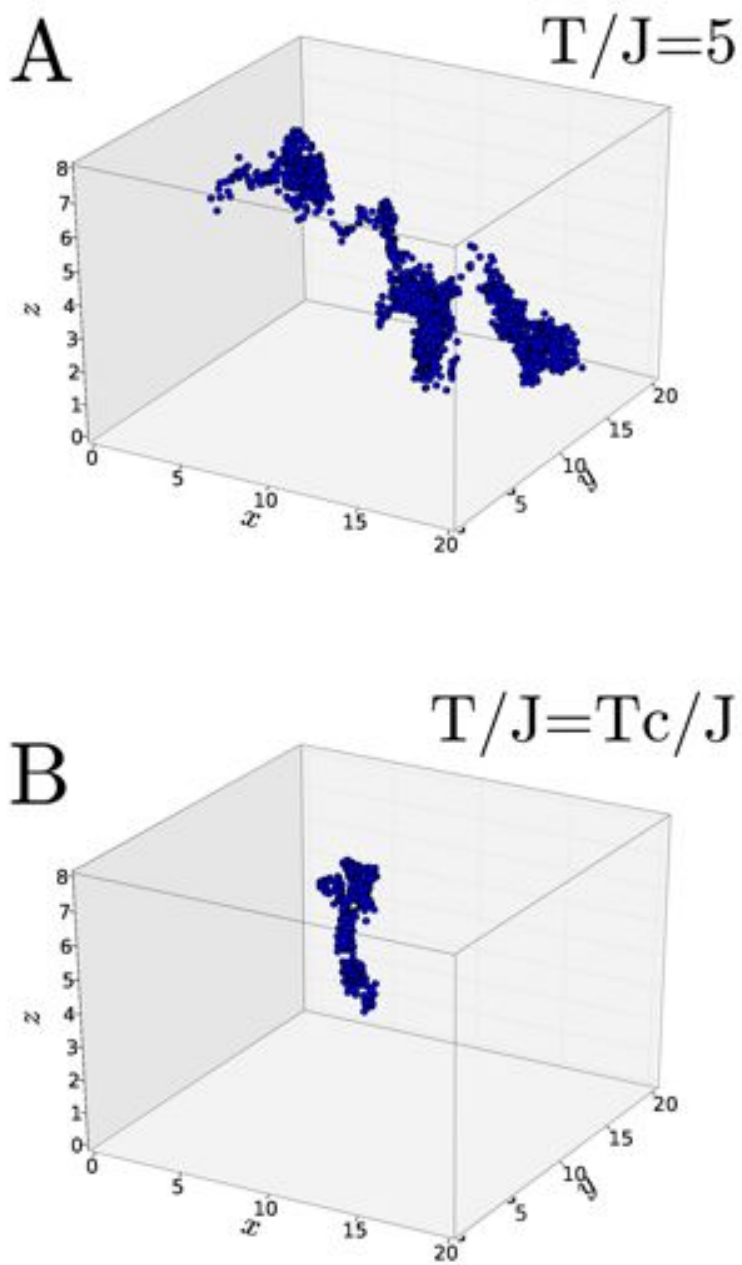

FIGURE 4.11 – *Trajet réalisé par un spin itinérant à travers une structure de taille* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$*, avec comme paramètres* $D = 0.5$*,* $D_1 = D_2 = a$*,* $I_0 = 2, K_0 = 0.5$*,* $E = 1$*. La figure A correspond au trajet à la température* $T/J = 5$*, la figure B correspond au trajet à* $T_c/J = 9.79$*.*

4.1.3 Influence des différents paramètres sur les courbes de résistances magnétiques

Dans la première partie de ce chapitre nous nous sommes concentrés sur l'interprétation d'une courbe de résistivité en fonction de la température. Nous avons fixé des paramètres liés aux différentes interactions qu'entretiennent les électrons avec le réseau, avec d'autres électrons, l'accélération due au champ électrique. Nous souhaitions avant de discuter l'effet des paramètres, faire ressortir les mécanismes de diffusion à l'origine de la courbe

de résistance magnétique. Aussi, avons-nous choisi un jeu de paramètres et justifié notre choix en plaçant ces premiers résultats dans le cadre de l'étude d'un semiconducteur ferromagnétique en couche mince. Il est maintenant nécessaire d'étudier les effets de chacun des paramètres sur les courbes de résistance. C'est l'objet de cette seconde partie.

Effets de taille

Afin de simuler un réseau en couches minces, nous utilisons des conditions périodiques appliquées sur les deux directions (x et y), la troisième direction (z) en est dépourvue. Ceci signifie que, dans le cas d'un réseau FCC dont les interactions sont limitées aux premiers voisins, les atomes se trouvant à l'intérieur de la structure interagissent avec douze voisins, alors que les atomes appartenant aux surfaces (001) interagissent avec 8 voisins. Les quatres interactions manquantes des sites de chacune des deux surfaces représentent une source d'instabilité, fonction du nombre de spins des surfaces (001) par rapport au nombre de spins du volume. Dans le cas où l'épaisseur devient très grande, l'effet des surfaces est tout à fait négligeable sur les valeurs des quantités physiques liées à la transition de phase. Ce n'est cependant pas le cas pour des structures en couches très minces. Nous avons tracé les aimantations de deux structures ayant des épaisseurs N_z différentes en fonction de la température. L'ordre magnétique des surfaces (001) se brise avant celui du volume, ce qui se traduit par une température de transition globalement plus faible, comme le suggère la figure 4.12. La température de transition est d'autant plus basse que l'épaisseur est faible.

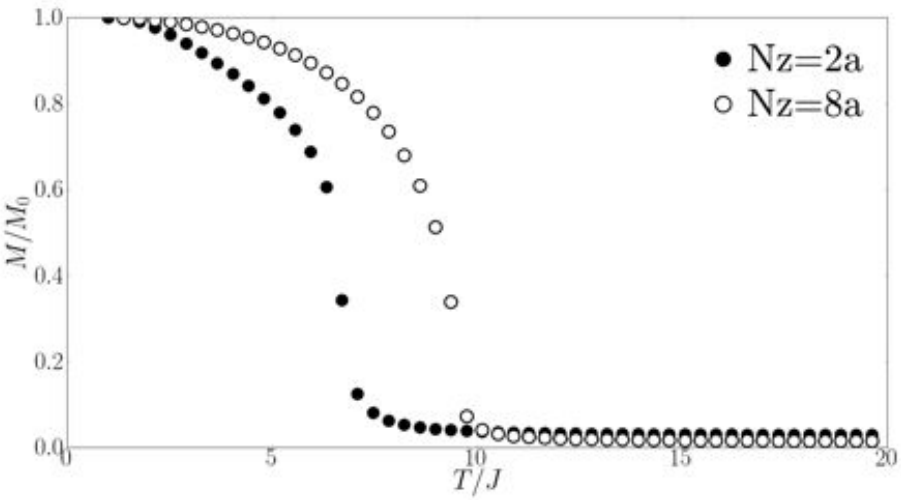

FIGURE 4.12 – *Courbes d'aimantations pour des structures de tailles* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 2a$, $T_c \sim 7.2$ *(ronds noirs), et* $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $T_c \sim 9.58$ *(ronds blancs).*

Effets d'interaction entre spins itinérants et spins du réseau

Observons l'effet de l'intensité des interactions entre les spins itinérants et les spins du réseau en fonction de la température. Nous avons présenté précédemment l'expression

de ce potentiel d'interaction $\mathcal{H}_{e-i}$ par 3.20. Ce potentiel est exponentielle, d'amplitude I_0 et décroissant avec la distance. L'interaction est limitée par une sphère de rayon D_1 centrée sur l'électron. Le choix de la forme du potentiel même s'il n'est pas réaliste n'a que peu d'importance car nous considérons dans toutes nos simulations des interactions à courte portée n'excédant guère un paramètre de maille a.

Sur la figure 4.13, nous présentons trois courbes de résistance pour trois valeurs de I_0 en fonction de la température. Ces trois paramètres sont fixés à $I_0 = 0.5$, $I_0 = 1$ et $I_0 = 2$. Les autres paramètres sont fixés tel que : $K_0 = 0.5$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$ avec $N_0 = 8 \times 20^2$ électrons itinérants.

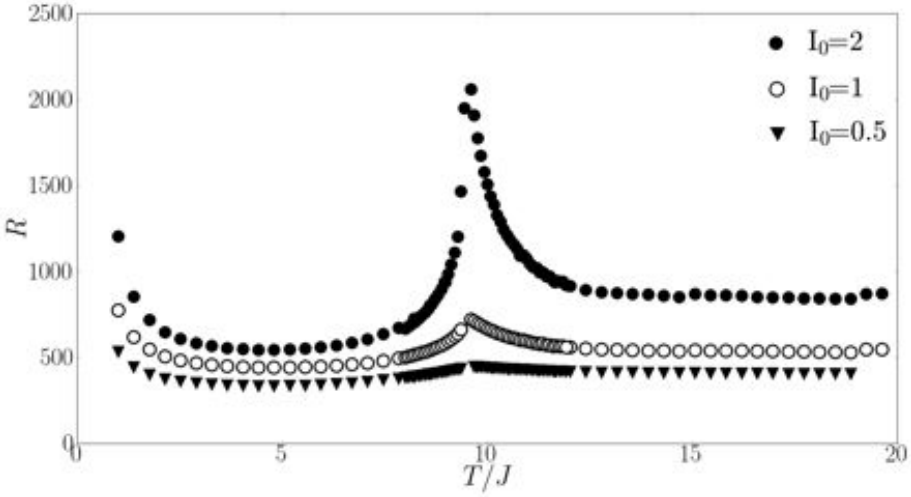

FIGURE 4.13 – *Résistance en fonction de la température pour différentes valeurs d'interaction électron-réseau I_0 : $I_0 = 2$ (ronds noirs), $I_0 = 1$ (ronds blancs), $I_0 = 0.5$ (triangles noirs).*

- A très basse température, la résistance augmente dans le sens des températures décroissantes. On observe que plus la valeur de I_0 est faible, et plus la résistance augmente lentement avec l'abaissement de la température. On comprend ce comportement avec l'argument suivant : pour les basses températures, les électrons se localisent sous l'effet de leurs interactions dans les minimums du potentiel périodique. Plus les interactions des électrons avec le réseau sont intenses, et plus il sera nécessaire de leur fournir de l'énergie afin de les faire bouger. Autrement dit, plus I_0 est faible et moins les électrons seront retenus par le réseau. L'énergie thermique à fournir pour augmenter la mobilité sera d'autant plus faible que I_0 sera petit.

- Autour de T_c les courbes de résistances présentent un pic. Nous constatons que la hauteur du pic est fonction de la valeur de I_0. Plus I_0 est grand, et plus le pic est prononcé. Nous avons expliqué les mécanismes qui s'opèrent autour de la transition. Nous les rappelons brièvement : les fluctuations temporelles ralentissent autour de T_c, le système percole. Dans cette gamme de températures, le réseau peut être décrit comme un enchevètrement de clusters massifs up et down. La mobilité des électrons est alors fortement réduite pour deux raisons. La première est due aux clusters down

que les électrons doivent contourner pour se propager le long du champ électrique. La seconde est due à un phénomène de localisation des électrons dans les clusters dû au ralentissement critique. Plus l'interaction I_0 (électron-réseau) est grande, et plus les effets des clusters up et down influent sur la dynamique des électrons, et plus le pic de résistance est prononcé.
Ceci souligne l'importance du rôle joué par les interactions des électrons avec le réseau. Le pic est une conséquence de cette interaction, elle met en relief l'effet d'ordre/désordre magnétique comme source de diffusion. Dans le cas des très faibles I_0, nous constatons que le pic est supprimer, nous sommes à la limite de la conduction dans les métaux. Notons que la résistance dans les métaux non-magnétiques présentent une évolution proportionnelle à T au-delà de la température de Debye (loi de Bloch). Nous ne pouvons observer cette tendance sur nos résultats car pour des raisons de temps de calcul nous ne prenons pas en compte la diffusion liée aux phonons. Il s'agit là de l'une des perspectives futures du travail à effectuer.

– Dans la phase paramagnétique, à haute température, la résistance sature lorsque $T \to \infty$. La diffusion est une conséquence des fluctuations des spins du réseau. Comme pour les autres températures, la résistance suit la valeur de I_0. Plus les spins itinérants interagissent avec le réseau, et plus la mobilité est faible, i.e. résistance importante.

Effets d'interactions entre spins itinérants

Nous faisons maintenant varier l'intensité des interactions entre spins itinérants K_0 dans $\mathcal{H}_{e-e}$ (Eq. 3.21) avec une interaction électron-réseau $I_0 = 2$, et un facteur de diffusion $D = 0.5$. Comme précédemment, les sphères d'interaction ont un rayon fixé à un paramètre de maille : $D_1 = D_2 = a$.

– A très basse température, la résistance est sensible à la valeur des interactions entre électrons. On constate que plus l'interaction K_0 est faible, et plus la résistance est forte (cf. figure 4.14). Dans cette gamme de températures, les électrons se logent dans les minimas du potentiel périodique du fait des fortes interactions I_0 qu'ils entretiennent avec le réseau, ainsi que de leurs interactions mutuelles K_0 et D. Les électrons sont polarisés et interagissent ferromagnétiquement les uns avec les autres. Pour de faibles valeurs de K_0, la position des électrons est principalement déterminée par le paysage énergétique du réseau. Cependant, lorsque K_0 augmente, on assiste à une compétition entre interaction du réseau et interaction entre électrons. Aussi, pour des valeurs de K_0 non négligeables devant I_0, l'ordre spatial pris par les électrons pour de faibles valeurs de K_0 est brisé, et la résistance décroît.

– Autour de T_c les résistances présentent un pic plus ou moins prononcé selon la valeur de K_0. Autour de T_c le réseau forme des clusters massifs up et down. L'augmentation de K_0 a pour effet d'accentuer le phénomène de localisation autour de T_c, car plus les électrons interagissent fortement, plus ils minimisent leurs énergies en se regroupant. Plus K_0 augmente, plus le phénomène de localisation augmente, et plus la résistance du matériau augmente.

– Dans la phase paramagnétique, à haute température, le système fluctue fortement. A chaque déplacement, l'électron se trouve dans un environnement énergétique différent qui induit la diffusion. Les électrons se déplacent sans cesse sans avoir le temps de se regrouper. Quel que soit K_0, la résistance sature à même valeur.

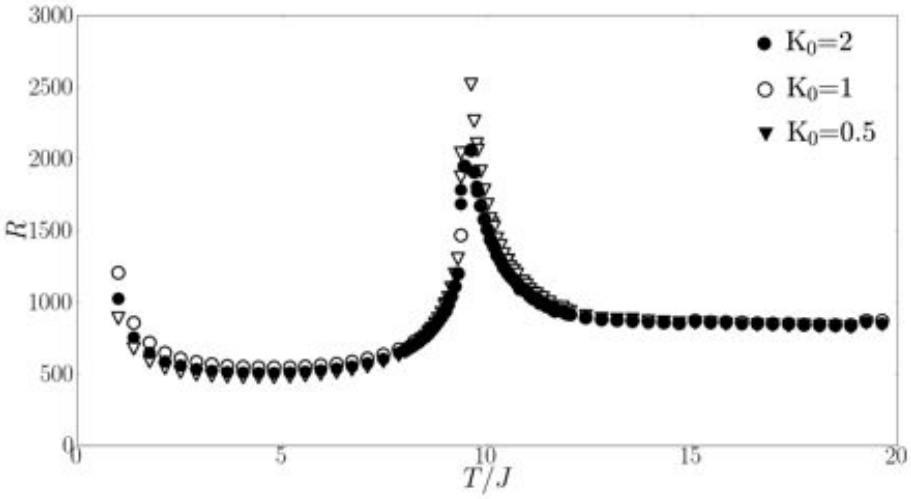

FIGURE 4.14 – *Résistance en fonction de la température pour différentes valeurs d'interaction électron-électron K_0 : $K_0 = 0.5$ (ronds blancs), $K_0 = 1$ (ronds noirs), $K_0 = 1.5$ (triangles blancs).*

Rayons des sphères d'interaction

On peut s'interroger sur le rôle joué par les rayons des sphères d'interaction D_1 et D_2, qui représentent les rayons de coupure des interactions entre spins itinérants et spins du réseau (D_1), et les interactions entre spins itinérants (D_2). Commenons par discuter les effets induits par D_1 sur le transport. Les résultats de calcul de la figure 4.15 représentent l'évolution de la longueur moyenne renormalisée de sauts des électrons en fonction de D_1. Afin de ne mettre en évidence que les effets des interactions entre les électrons et le réseau, nous fixons $K_0 = D = 0$, les interactions entre électrons sont coupées. La sphère d'interaction D_2 n'a donc aucun effet sur les mesures. Les simulations sont réalisées sur une structure FCC de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, $I_0 = 2$ et la température est fixée à $T = 1$.

La longueur de saut en fonction du rayon D_1 est montrée dans la figure 4.15. Pour de faibles valeurs de D_1, les électrons ne visitent qu'une partie du réseau, la longueur des sauts est tributaire de D_1, car le paysage en énergie en dépend fortement. Nous présentons l'évolution de la forme du potentiel périodique dans un volume d'une maille élémentaire en fonction de D_1. Pour réaliser ces visualisations, nous déplaçons un électron à l'intérieur d'une maille, et mesurons l'énergie de cet électron avec le réseau en chaque point. Cette maille est choisie au centre de la structure afin d'inhiber les effets de surface (cf. Fig. 4.16). Pour chacune des visualisations, nous ne représentons que les isosurfaces de plus hautes et de plus basses énergies (isosurfaces rouges et bleus respectivement) ressenties par un

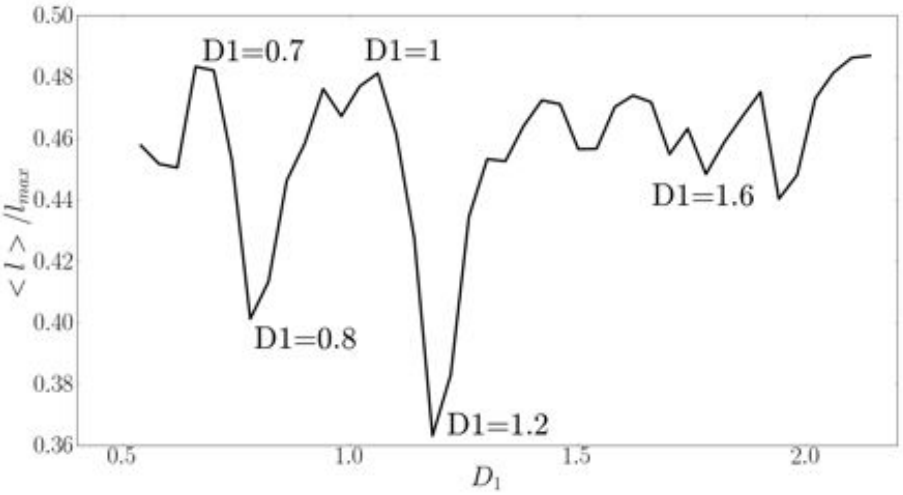

FIGURE 4.15 – *Mesure de la longueur moyenne renormalisée de sauts des électrons en fonction du rayon de la sphère d'interaction D_1.*

électron pour un rayon D_1 donné à $T = 1$. Les zones vides correspondent à des isosurfaces d'énergies intermédiaires que nous ne représentons pas afin que ces visualisations restent lisibles, mais dont la majeur partie correspond à l'énergie moyenne du domaine mesuré.
La première chose à remarquer est que nous pouvons grâce à ces visualisations déterminer les zones de localisation des électrons à basse température, et observer que ces puits de potentiel se déplacent selon les valeurs de D_1. $D_1 = 0.2a$ représente une interaction à très courte porté, les électrons ne distinguent qu'un seul site du réseau, et n'interagissent avec rien ailleurs. On retrouve donc un potentiel périodique qui n'est autre qu'une représentation en énergie du réseau cristallin, les zones de basses énergies se situent autour des sites du réseau FCC. Pour $D_1 = 1a$ les minimums se trouvent en (1/4,1/4,1/4), (3/4,1/4,1/4), (1/4,1/4,3/4), (3/4,1/4,3/4), (1/4,3/4,1/4), (3/4,3/4,1/4), (1/4,3/4,3/4), (3/4,3/4,3/4). Pour $D_1 = 1.2a$ ces minimums correspondent au réseau FCC translaté d'une demie maille, etc.
On peut également établir des recoupements avec la courbe 4.15. L'accroissement de D_1 étend la portée des interactions, et les électrons interagissent localement avec plusieurs sites du réseau. Le potentiel périodique évolue donc en fonction de D_1. Pour $D_1 = 0.7a$, la longueur moyenne de sauts est élevée. Le potentiel présente une surface homogène de basse énergie. On se souvient que le déplacement d'un électron est pondéré par la différence d'énergie entre deux points de l'espace, il s'agit de l'algorithme de Métropolis [87]. Dans ce cas, la probabilité que l'électron se déplace est grande, car la différence d'énergie d'un point à un autre est faible, et le champ électrique tend à favoriser la probabilité de sauts.
Pour $D_1 = 0.8a$, on observe un contraste entre les zones de basses et hautes énergies. Les électrons vont avoir tendance à se localiser à proximité des zones de basses énergies, et vont devoir vaincre une barrière de potentiel importante pour se déplacer, la longueur des sauts chute. Pour $D_1 = 1a$, les zones de basses énergies sont relativement larges et peu espacées, les électrons peuvent sauter de l'une à l'autre. Pour $D_1 = 1.2a$, comme pour $D_1 = 0.8a$, la différence d'énergie réduit la capacité de déplacement des électrons. Enfin, pour de grandes valeurs de D_1, le potentiel est homogène et n'évolue guère avec D_1. Nous

choisissons pour réaliser nos simulations un rayon $D_1 = a$, qui permet aux porteurs de bien explorer l'espace de la structure du réseau, et qui représente un compromis optimal en terme de temps de calcul.

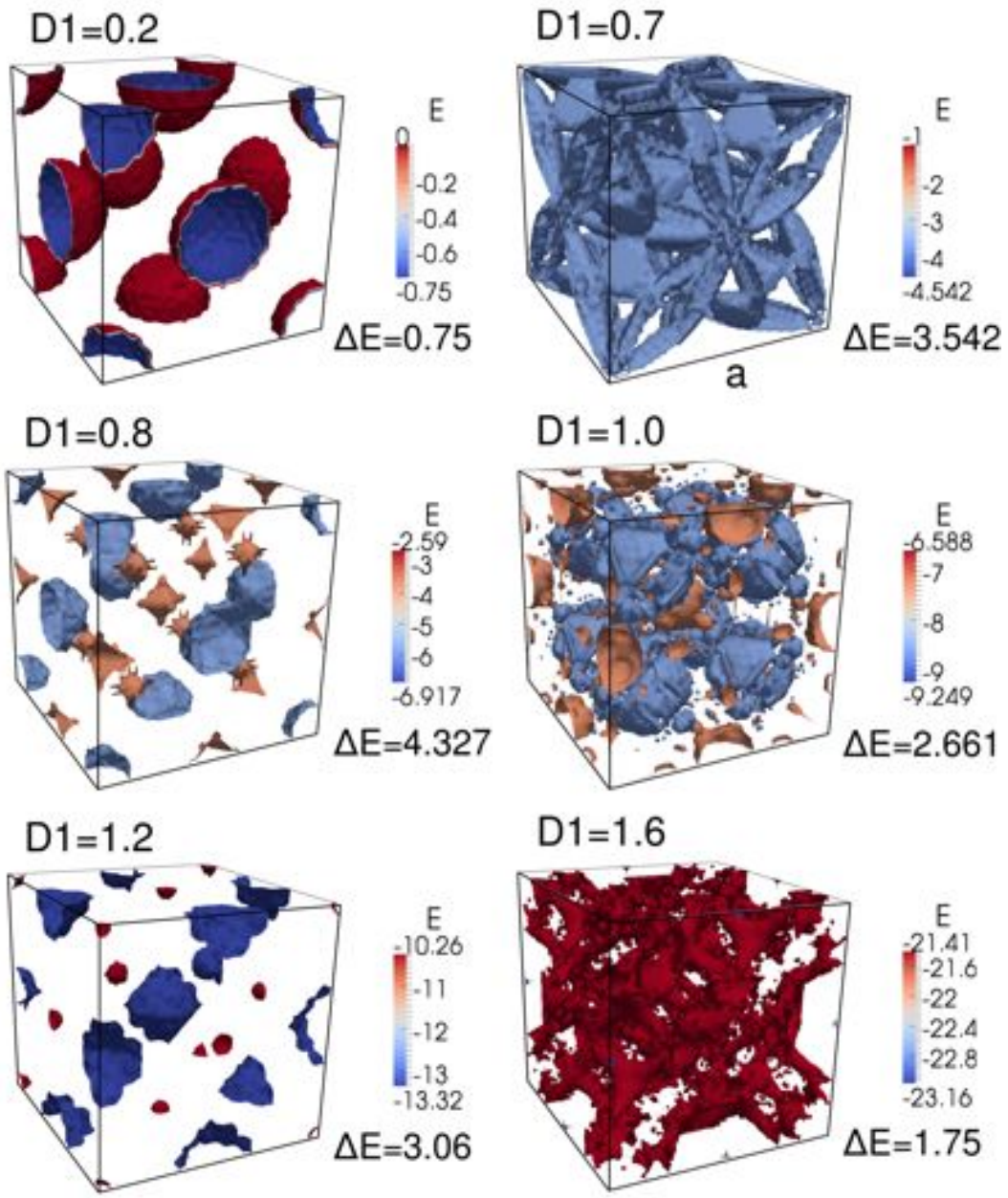

FIGURE 4.16 – *Isosurfaces d'énergie avec ajout d'une nappe de couleur représentant l'intensité des énergies à l'intéreur d'une maille pour différentes valeurs de D_1.*

Effet du gradient de diffusion

Dans la part des simulations que nous réalisons, nous polarisons les spins itinérants pour réaliser un gain en temps de calcul. Nous verrons plus loin que cette approximation ne change pas considérablement le comportement de la résistance magnétique. Cependant,

les interactions entre électrons ont tendance à minimiser l'énergie globale du système. Ce faisant, sans l'intervention d'une énergie répulsive, modélisée par l'effet d'un gradient de diffusion, les électrons vont avoir tendance à se regrouper et former des grappes (cf. figure 4.17). Afin d'éviter ce genre de comportement et d'assurer une distribution spatiale homogène, il est crutial de fixer une valeur D au Hamiltoninen $\mathcal{H}_{e-e}$ (Eq. 3.23), capable de rivaliser avec l'énergie d'interaction entre spins itinérants. Avant de réaliser une simulation, nous traçons la courbe limite, figure 4.18 séparant une zone de collapse (formation de grappes), d'une zone dans laquelle les électrons ont une distribution homogène.

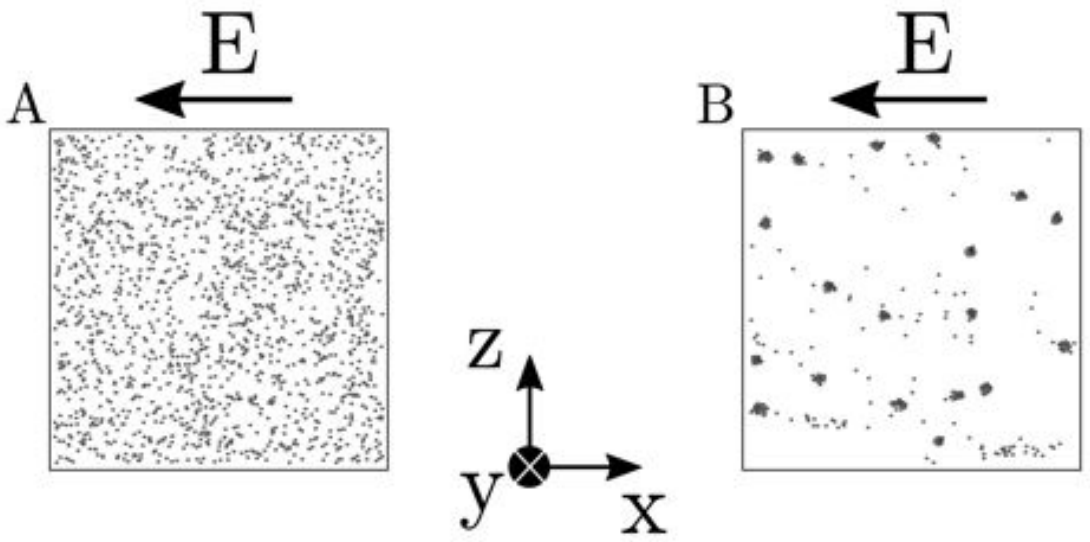

FIGURE 4.17 – A : *Gaz d'électrons homogène,* $D \neq 0$. B : *Collapse des électrons en l'abscence de terme diffusif,* $D = 0$. *Les électrons sont représentés par les points noirs, la boîte de simulation est présentée selon le plan* xz. *Les électrons sont au nombre de* $N_0 = 3200$ *dans une structure de taille équivalente à* $20 \times 20a \times 20a$ *la température est fixée à* $T = 1$.

Dans le cas de simulations sur des structures ferromagnétiques nous fixons $D = 0.5$, soit approximativement le double de la limite de collapse pour une interaction entre spins itinérants fixée à $K_0 = 0.5$. Cette marge de sécurité nous garantit une bonne homogénéité des électrons lors des phases de calcul du transport.

4.1.4 Transport de spins polarisés et non-polarisés

Nous utilisons toujours des densités d'électrons ~ 1 électron par maille avec de fortes interactions entre spins itinérants et spins du réseau afin de mettre en évidence l'effet d'ordre magnétique du cristal sur les propriétés de transport. Nous traitons les électrons comme un gaz dans un état ferromagnétique. Même si à température finie une partie des spins itinérants s'inversent, nous allons voir que les simulations tenant compte de la possibilité de retournement du spin des porteurs ne montrent pas de différences significatives avec les simulations dont les spins itinérants sont polarisés :

– A très basse température, les spins du réseau sont dans l'état ferromagnétique "up". Le courant majoritaire est dû aux spins itinérants "up" $R_\downarrow \to \infty$. Les spins

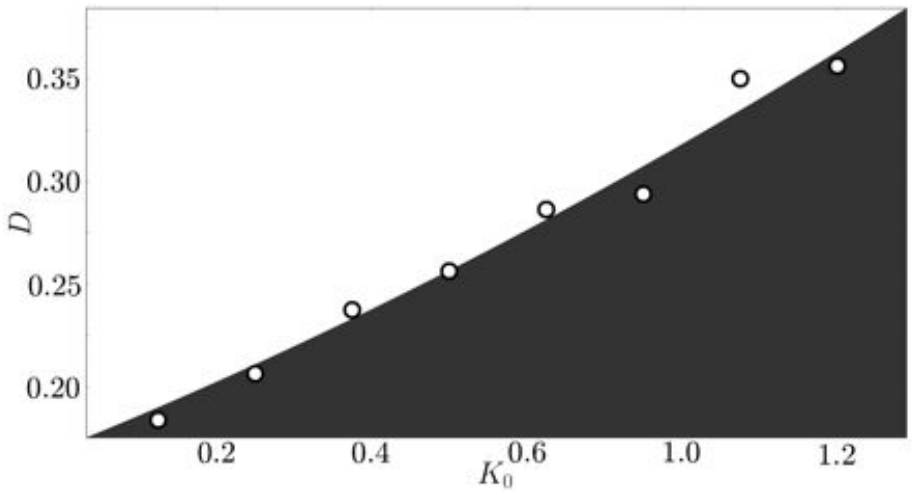

FIGURE 4.18 – *Diagramme de phase de collapse des électrons en fonction de D et K_0 à $T = 1$. La zone noire correspond à un domaine de collapse, la zone blanche à une zone homogène.*

itinérants "down" ne contribuent pas au transport du fait de leurs interactions ferromagnétiques avec les spins du réseau (cf. Fig. 4.19). Ajoutons que la faible densité de porteurs permet de négliger les interactions entre porteurs majoritaires et minoritaires.

– Au-dessous de T_c, le réseau présente un ordre ferromagnétique comportant un certain nombre de sites occupés par des spins down. Ces spins antiparallèles vont permettre le retournement des spins itinérants, et faire émerger une densité de porteurs down, on constate que $R_\downarrow$ décroît.

– Autour de T_c, le réseau présente un enchevêtrement de clusters massifs up et down. Nous pouvons constater que les contributions des spins up et down sont identiques, $R_\uparrow = R_\downarrow$.

– A très haute température, le réseau est dans un état paramagnétique, les spins du réseau sont complètement désordonnés, les spins itinérants up et down sont à densité égale et contribuent de façon identique au transport. Les courbes de résistances saturent pour les deux types de spins autour de $R_\uparrow \sim R_\downarrow \sim 2000$.

Pour finir, nous avons superposé la résistance calculée à partir de spins polarisés et de spins non-polarisés dans la figure 4.20. On constate sans surprise qu'à basse température aucune différence n'est à souligner.
La hauteur du pic de résistance dans le cas d'électrons polarisés est légèrement plus importante que dans le cas non-polarisé. A T_c, les électrons se localisent dans des clusters de spins parallèles. Dans le cas d'électrons non-polarisés, nous aurions pu intuiter de prime abord que la capacité d'un électron à renverser son spin ait pour conséquence d'abaisser considérablement la hauteur du pic de résistance, l'électron sautant de cluster en cluster en adaptant son spin parallèlement à son environnement local. Même si cela

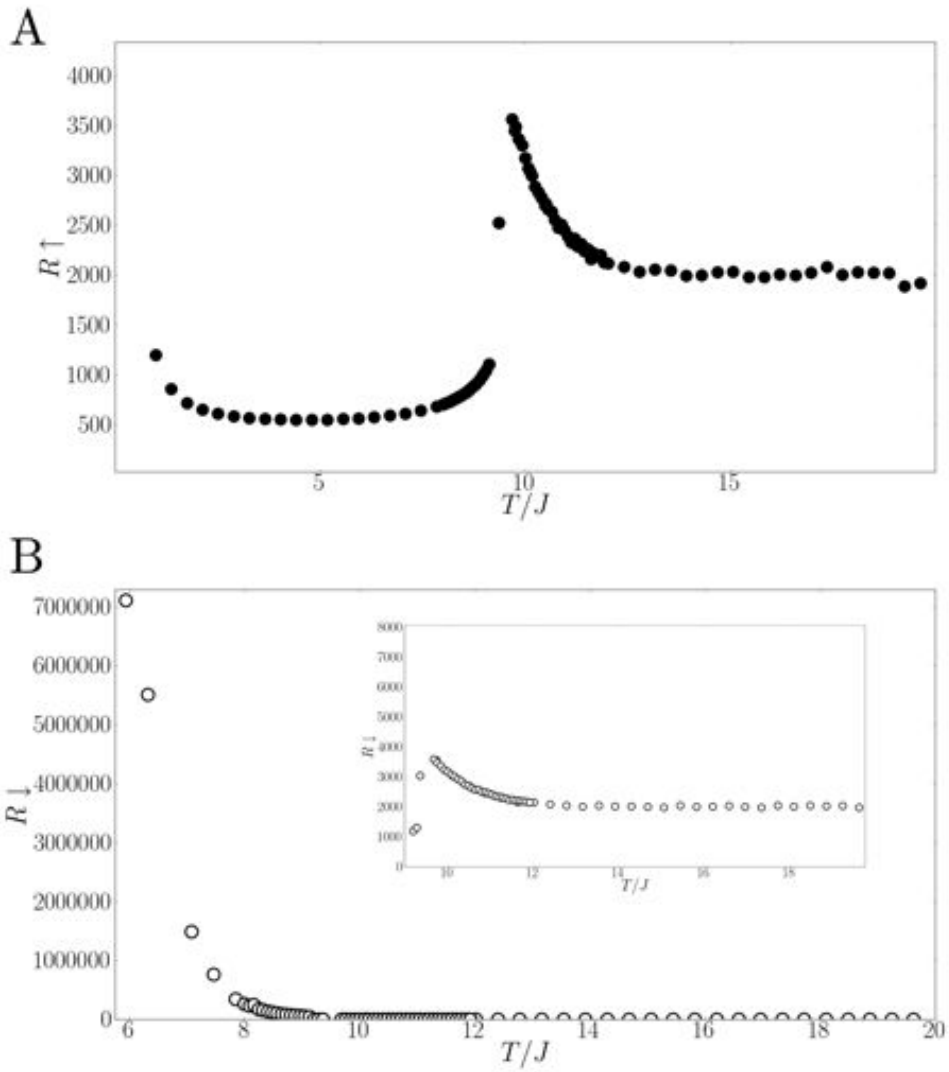

FIGURE 4.19 – A :*Résistance de spins up en fonction de la température.* B : *Résistance de spins down en fonction de la température.*

se produit, l'électron se heurte à une surface antiferromagnétique à la jonction de deux clusters antiparallèles du réseau. Cette surface aussi fine soit-elle conduit les électrons non-polarisés au même mécanisme de localisation. Les électrons up occupent les clusters up, et les électrons down les clusters down.
Après la transition, la résistance mesurée à partir d'électrons non-polarisés présente une résistance plus forte que pour les électrons polarisés. Ceci provient du fait que le spin des électrons itinérants peut s'adapter aux fluctuations des spins du réseau. Les électrons non-polarisés diffusent donc moins que des électrons polarisés, et la hauteur de la résistance se trouve légèrement augmentée.

4.1.5 Temps de relaxation et influence du ralentissement critique du réseau sur la résistance

Nous sommes dans le cas du modèle d'Ising. Les électrons en interactions avec les spins du réseau ne ressentent pas un réel champ de magnons, mais une fluctuation locale

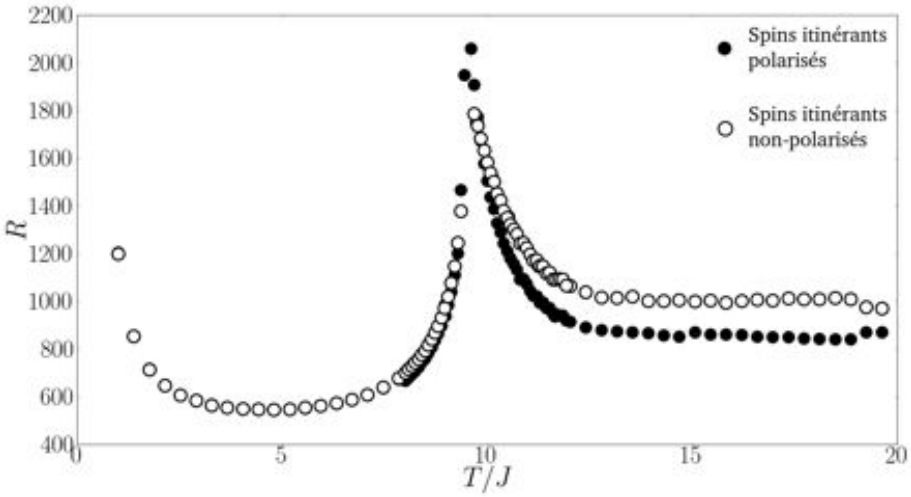

FIGURE 4.20 – *Résistances dans le cas de spins polarisés et non-polarisés (ronds noires et blancs respectivement) en fonction de la température. Notons qu'à basses températures les courbes de résistance se superposent parfaitement. La densité de porteurs down est nulle, et les résultats de deux simulations sont identiques.*

des spins du réseau que nous modélisons par le découpage du calcul de transport en plusieurs étapes de calcul. Entre deux étapes, nous effectuons des rethermalisations du réseau. L'idée repose sur l'évolution du temps de relaxation du réseau τ_L par rapport au temps de relaxation des électrons τ_I en fonction de la température. Pour modéliser la dépendance temporelle du réseau de spins, nous utilisons la relation 3.18.
La simulation se déroule ainsi : après avoir mis le réseau à l'équilibre, nous injectons N_0 spins itinérants qui vont se déplacer pendant N_1 pas Monte Carlo de transport. Le réseau est alors rethermalisé pendant N_2 pas Monte Carlo sur réseau afin d'amener l'état d'équilibre initiale vers un nouvel état décorrélé du précédent. Nous relançons alors la phase de transport pendant N_1 pas. Cette procédure est répétée N_3 fois. Plus N_2 et N_3 sont grands, plus la statistique sur les observables mesurées sera précise. Cependant, N_1 représente le temps de transport pendant lequel les spins itinérants vont se propager à travers une configuration d'équilibre donnée. N_1 correspond donc au temps de relaxation du réseau τ_L, dont l'évolution est fonction de la température. Ce paramètre est donné par l'expression 3.18 [72].

$$\tau_L = N_1 \quad = \quad \frac{A}{\left|1 - \frac{T}{T_c}\right|^{z\nu}}$$

Dans cette expression ν et z sont respectivement les exposants critiques de corrélation et de dynamique. Pour des systèmes non-frustrés avec interactions d'Ising, ces paramètres prennent les valeurs suivantes : $\nu = 0.638$, $z = 2.02$. Nous voyons que cette expression diverge lorsque $T \to T_c$. Ceci modélise le fait qu'à la température de transition T_c, le réseau subit un ralentissement critique. La fonction de corrélation spin-spin diverge, ce qui a pour effet de rendre le temps de relaxation extrêmement long. Nous ajoutons à l'expression 3.18 une constante de proportionalité A qui va nous permettre de fixer un point de référence par un choix de sa valeur comme on le verra plus loin.

Nous comparons dans un premier temps les résultats avec et sans prise en compte du temps de relaxation pour une structure cubique centrée (BCC) ferromagnétique. Nous choisissons une structure BCC afin de comparer un peu plus loin les résistances pour ce réseau non-frustré ferromagnétique et antiferromagnétique. Nous verrons par la suite que le réseau FCC antiferromagnétique est un système frustré dans lequel les comportements de transport se trouvent bouleversés par rapport au cas des structures non-frustrés. Nos simulations sont réalisées sur un réseau de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, et nous choisissons comme paramètres $I_0 = 2$, $K_0 = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $D = 0.5$. Le champ électrique est fixé à $E = 1$, le nombre d'électrons à $N_0 = 1600$. Nous fixons enfin la constante A de l'expression 3.18 à $A = 1$ de tel sorte que $\tau_L = 1$ pour $T = 2T_c$, c'est-à-dire assez loin de T_c dans la phase paramagnétique. Ces paramètres ont été fixés de la même manière que précédemment, afin de mettre en avant les interactions entre spins itinérants et spins du réseau tout en tenant compte de faibles interactions entre électrons. Dans le cas où nous prenons en compte le temps de relaxation, les valeurs numériques de τ_L et N_1 sont fixées par l'expression 3.18. Dans le cas où le temps de relaxation n'est pas pris en compte $N_1 = 1000$. Le temps de rethermalisation du réseau et le nombre de rethermalisations sont respectivement donnés par $N_2 = 500$ et $N_3 = 2.10^4$.
La figure 4.21 présente les courbes de résistance R avec et sans prise en compte du temps de relaxation. Nous noterons au passage que le fait de réaliser nos simulations sur un réseau BCC induit une transition à $T_c = 6.35$, en accord avec les grandeurs théoriques du tableau 3.2.

Comparons les courbes :

1. A $T < T_c$, les deux courbes se superposent.

2. A la température de transition T_c, la courbe pour laquelle nous ne prenons pas en compte le temps de relaxation présente un épaulement, alors que la courbe pour laquelle nous prenons en compte le temps de relaxation présente un pic prononcé, et une forte décroissance après T_c.

3. Après la transition, dans la phase paramagnétique, les deux résistances saturent mais à différentes valeurs.

1. Discussion des résistances à $T < T_c$:

Lorsque $T < T_c$, les courbes de résistances se superposent. A basse température, le réseau présente un état magnétique ordonné dépourvu de fluctuations. Le passage d'un état d'équilibre du réseau à un autre état d'équilibre (ce qui correspond dans notre modèle à une rethermalisation du réseau) ne modifie pas le paysage énergétique du système. Quelque soit le temps de relaxation du réseau τ_L, et le temps N_1 pendant lequel un électron explore le système entre deux rethermalisations, les électrons retrouvent un état ordonné qui n'a pas ou peu évolué. Ceci explique la superposition des courbes avec ou sans prise en compte du temps de relaxation.

2. Discussion des résistances à $T \sim T_c$:

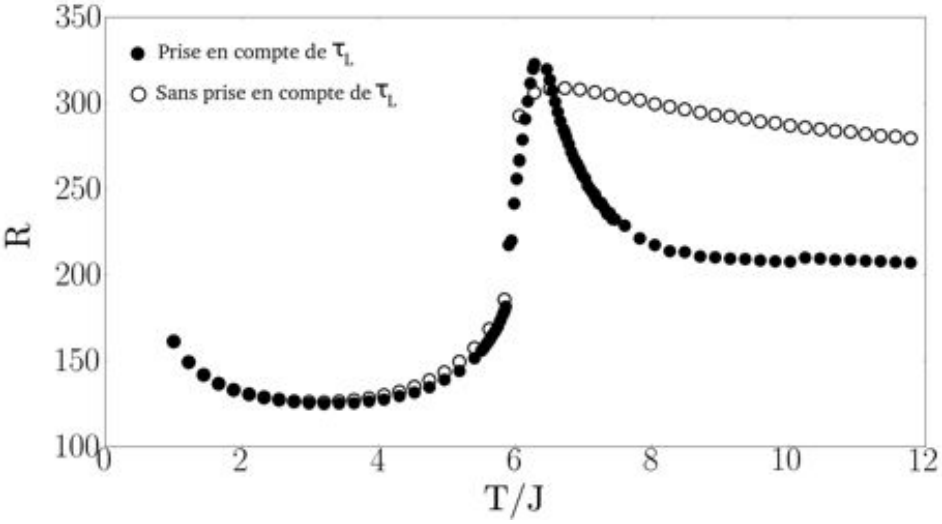

FIGURE 4.21 – *Courbes de résistance d'un réseau BCC ferromagnétique en fonction de la température avec (ronds noirs) et sans (ronds blancs) prise en compte du temps de relaxation τ_L du réseau.*

A la température de transition, le temps de relaxation τ_L diverge et N_1 prend de grandes valeurs numériques. Les électrons itinérants se déplacent longuement dans une même configuration d'équilibre du réseau. Les électrons ont alors un temps nécessaire pour contourner les clusters antiparallèles (zones énergétiquement défavorables) du réseau, et venir se localiser dans les clusters parallèles (zones énergétiquement favorables), donnant lieu à l'apparition du pic de résistance. Dans le cas où nous ne tenons pas compte du temps de relaxation, le temps de propagation des spins itinérants n'est pas suffisant pour induire la localisation et faire apparaître un pic prononcé de résistance. Pour $N_2 = 500$, la résistance laisse apparaître un léger épaulement. Il est clair qu'un abaissement de la valeur de N_2 fera disparaitre complètement toute singularité de résistance à T_c.
Il est intéressant de souligner la corrélation entre τ_L et τ_I. A T_c, τ_L diverge, le réseau subit le ralentissement critique. Dans le cas de la prise en compte du temps de relaxation sur le transport, les électrons se localisent dans des zones de basses énergies. Une conséquence directe de la localisation des spins itinérants peut être observée par le biais du comportement du temps de collision des électrons, qui exhibe un pic à la transition comme le montre la figure 4.22. Lorsque τ_L augmente, le temps de collision τ_I décroît.

3. Discussion des résistances à $T > T_c$:

Dans la phase paramagnétique, nous constatons que les deux résistances saturent à deux valeurs distinctes. Dans le cas où nous effectuons le transport en tenant compte de la relaxation du réseau, à chaque pas Monte Carlo de transport le système est rethermalisé, autrement dit $N_1 = 1$. De fait, un électron itinérant voit un environnement qui évolue à chacun de ses déplacements. Les électrons diffusent fortement, et la résistance est moindre que dans le cas où nous ne tenons pas compte du temps de relaxation où $N_1 \gg 1$.

Pour conclure cette partie consacrée aux effets de relaxation sur les propriétés de

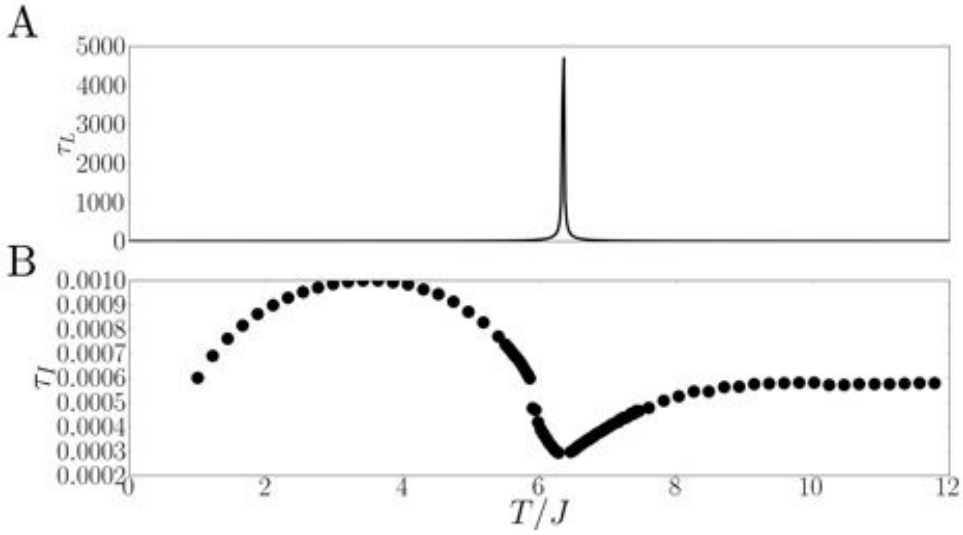

FIGURE 4.22 – A : *Courbes du temps de relaxation τ_L en fonction de la température pour une structure BCC.* B : *Courbes du temps de collision τ_I des électrons itinérants en fonction de la température pour une structure BCC.*

transport, observons l'effet du paramèrte A de l'expression 3.18. Une augmentation de A a pour effet d'augmenter les valeurs de τ_L et d'élargir son profil de part et d'autre de T_c. Les courbes de résistance suggèrent cependant qu'une variation de A n'a d'effet qu'après le pic de résistance (cf. Fig. 4.23). Cette figure soulève une question : si le temps de relaxation τ_L est symétrique en T_c, pourquoi les résistances mesurées pour deux valeurs du paramètre A ne se distinguent qu'après le pic de R. Avant la transition et à T_c, les électrons ont un temps relativement important pour explorer le système, et se localisent dans les clusters parallèles du réseau. Une fois localisé, une quelconque variation de τ_L, autrement dit de N_1 (temps de propagation des spins itinérants dans une même configuration d'équilibre) n'a aucun effet sur la dynamique des spins, les courbes de résistances sont identiques. Par contre, lorsque la température augmente après la transition, le désordre des spins du réseau fait que les électrons évoluent dans un environnement qui devient de plus en instable avec l'augmentation de la température. Pour un électron, A représente un paramètre de contrôle des fluctuations. Plus A est grand, et plus τ_L est grand. Dans ce cas, l'électron se propage à travers la même configuration du réseau pendant un temps important car les fluctuations sont lentes. A l'inverse, plus les fluctuations ressenties par l'électron sont importantes (faibles valeurs de τ_L), plus l'électron est en contact avec des sources de diffusion, et plus la résistance est faible.

4.2 Résistance magnétique et dépendance en champ magnétique

ANALYSONS maintenant l'effet du champ magnétique appliqué le long de l'axe x sur la résistance magnétique. Le champ magnétique est appliqué parallèlement aux spins itinérants ainsi qu'aux spins du réseau, mais également au champ électrique comme le montre la figure : 4.24. Ceci permet de ne pas faire intervenir la force de Lorentz et de simplifier le mouvement des électrons dans la structure et l'interprétation des résultats.

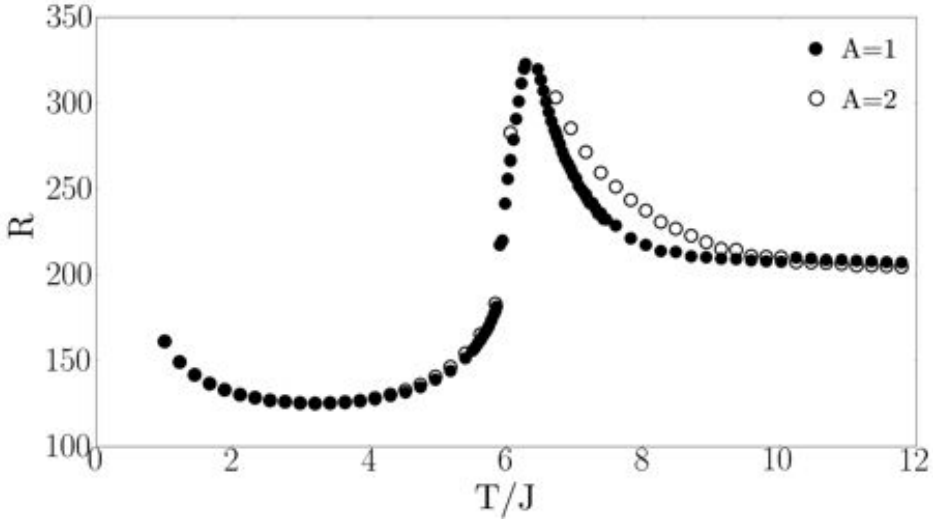

FIGURE 4.23 – *Résistance en fonction de la température pour deux valeurs de la constante A : $A = 1$ (ronds noirs) et $A = 2$ (ronds blancs).*

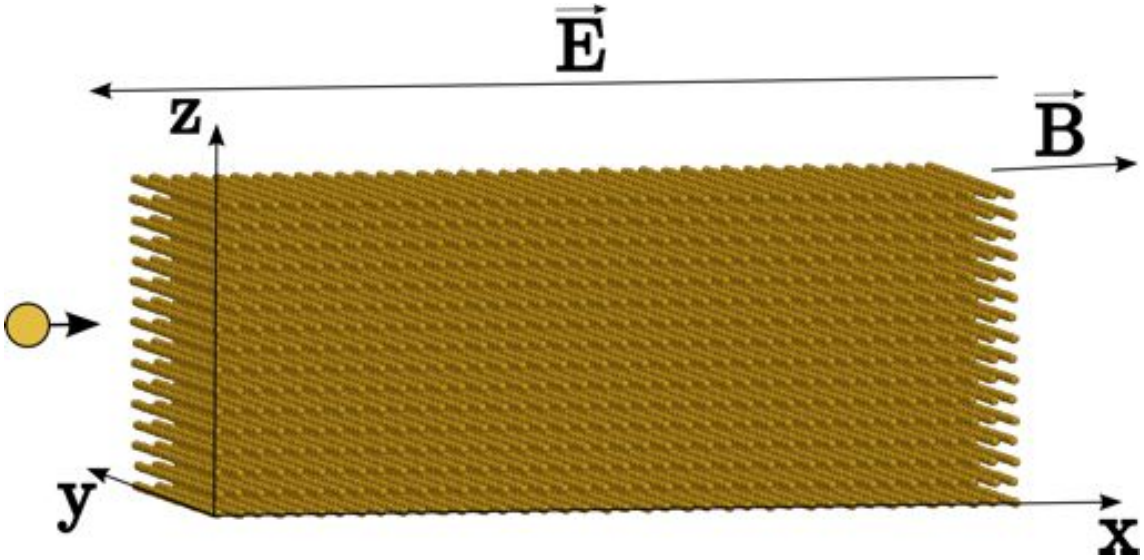

FIGURE 4.24 – *Structure ferromagnétique de dimensions $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8$, sur laquelle est appliqué un champ électrique $\vec{E}$ et un champ magnétique $\vec{B}$ le long de l'axe x. Les points jaunes représentent les spins up sur les sites du réseau.*

Nous montrons sur la figure 4.26 que le champ magnétique a pour effet de réduire la hauteur du pic avec l'augmentation de la valeur du champ. On remarque également que plus le champ magnétique appliqué est intense, et plus le maximum de résistance est décalé vers les hautes températures. Pour expliquer ces deux tendances, basons-nous sur l'interprétation des clusters faite plus haut. L'application d'un champ magnétique sur un film ferromagnétique a pour premier effet de supprimer la transition de phase car l'aimantation n'est jamais nulle sous champ. Le champ a tendance à retenir les spins

sur son axe. La taille des clusters up augmente au détriment de celle des clusters down. Les électrons ont une mobilité d'autant plus grande que les zones défavorables d'énergies (clusters antiparallèles) se trouvent réduites. De plus, le ralentissemnt critique n'existe plus car la transition est supprimée. Il résulte de l'application du champ une diminution globale de la résistance du solide.
Le déplacement du maximum de résistance vers les hautes températures avec l'augmentation du champ magnétique, est une conséquence de la modification de la dynamique des spins du réseau par le champ. Plus le champ appliqué est intense, et plus les spins du réseau sont rigides. Les spins ne deviennent désordonnés qu'à une température plus élevée.
A basse température, le réseau est purement ferromagnétique, l'énergie thermique même en l'abscence de champ magnétique est trop faible pour désordonner le système. Les courbes de résistances se superposent.
A très haute température, le champ n'a plus d'effet et les courbes de résistance se superposent car l'énergie thermique l'emporte sur l'effet d'ordre qu'impose le champ magnétique.

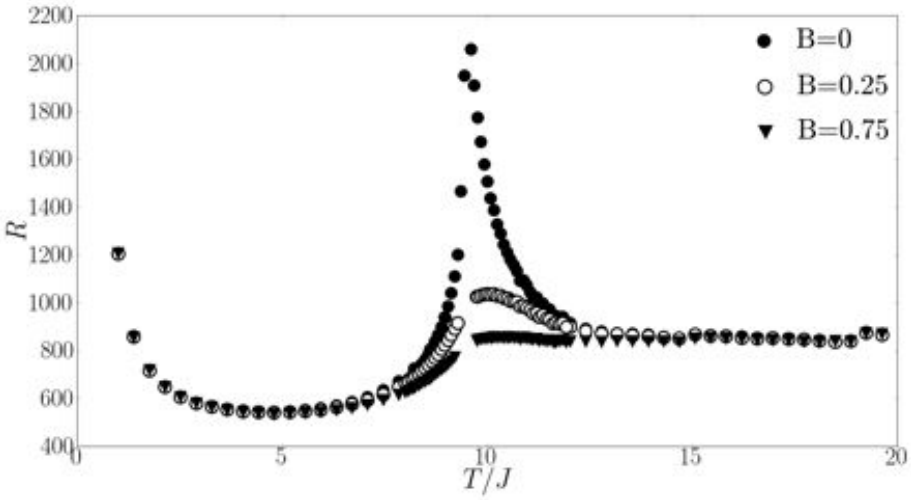

FIGURE 4.25 – *Courbes de résistance en fonction de la température pour différentes valeurs du champ magnétique : $B = 0$ (ronds noirs), $B = 0.25$ (ronds blancs), $B = 0.75$ (triangles noirs).*

Deux études théoriques forts intéressantes ont été réalisées par Kataoka [55] et Zarand [126], sur les effets du champ magnétique dans les problèmes de conduction autour de la température de transition de solides magnétiques. Kataoka traite le problème par le biais de l'équation de Boltzmann et montre que le champ magnétique réduit le pic de résistance autour de la transition. Zarand utilise pour sa part un modèle reposant sur la théorie de localisation. Les mêmes conclusions sont apportées au problème.

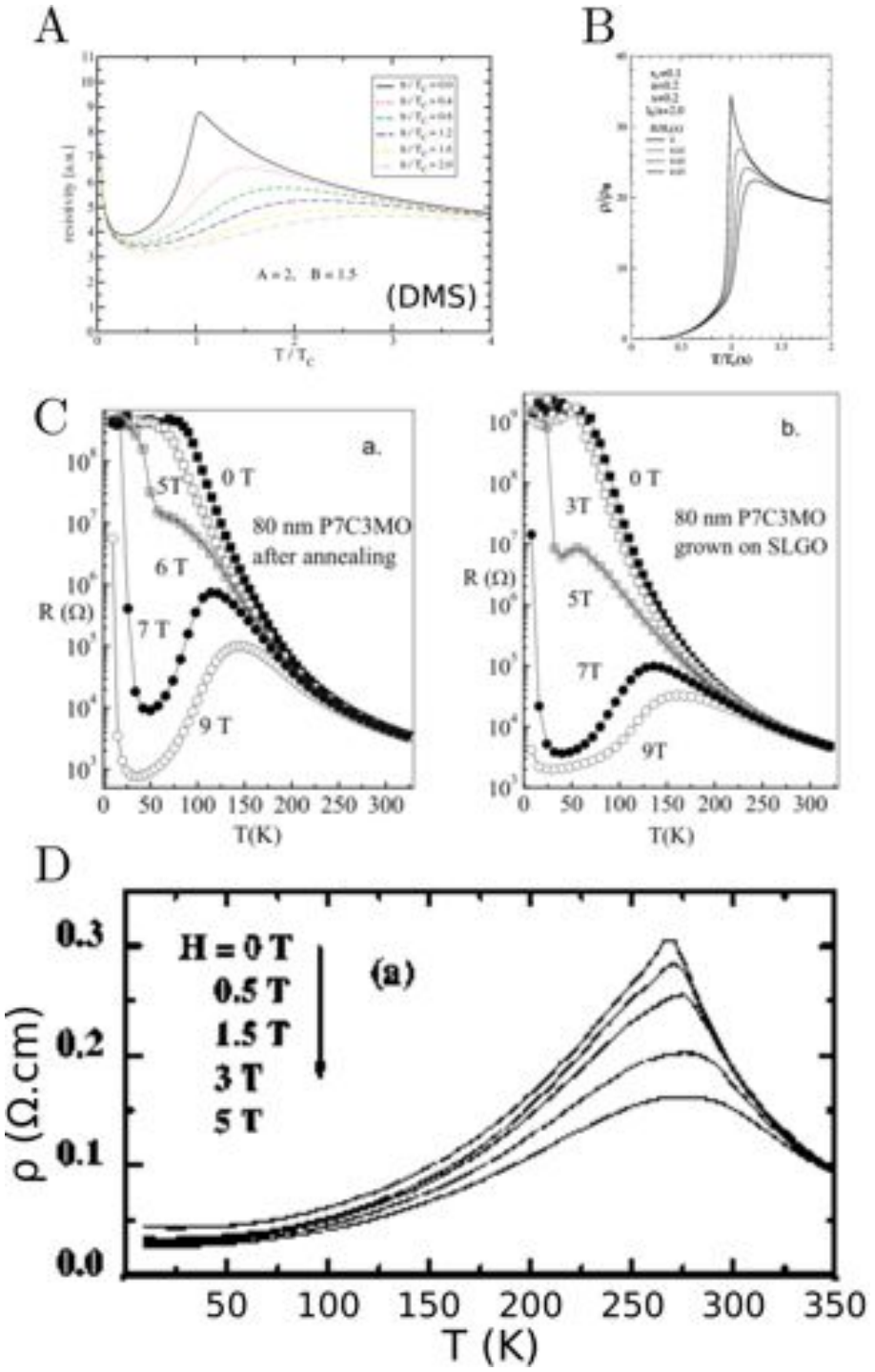

FIGURE 4.26 – A : *Courbes de résistivité en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétique. Article de Zarand [126].* B : *Courbes de résistivité en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétiques. Article de Kataoka [55].* C : *Courbes de résistances fonction de la température pour différents valeurs de champ magnétiques dans P7C3MO, courbes tirées de l'article de Zhang et al. [127].* D : *Courbes de résistivité de* $La_{0.7-x}Y_xCa_{0.3}MnO_3$ *(manganite) en fonction de la température pour différentes valeurs de champ magnétiques. Courbes tirées de l'article de Souza et al. [107].*

4.2.1 Discussion

Nous avons présenté dans le chapitre 2 les principales théories concernant l'étude de la résistance magnétique dans les métaux et les semiconducteurs magnétiques. Nous avons commencé par présenter le travail de De Gennes et Friedel [24], qui représente un article pionnier en ce qui concerne l'origine du pic de résistance magnétique R pour les métaux ferromagnétiques. Dans ce travail, les auteurs ont eu l'idée de relier le pic de susceptibilité à celui de la résistance magnétique, en suggérant au préalable que R est reliée à la corrélation des spins du réseau $< \vec{S}_i.\vec{S}_j >$. Cependant, à la transition, la suceptibilité diverge ce qui n'est pas le cas des métaux magnétiques. La résistance des métaux magnétiques présentent deux types de comportements à la transition T_c : résistance présentant un pic, ou résistance ne présentant pas de pic (dans ce dernier cas c'est la dérivée de la résistance par rapport à la température qui en présente un). A partir de l'idée de De Gennes et Friedel, Fisher et Langer [39] explique le comportement de résistance dans les métaux par le fait des corrélations à courtes portées des spins du réseau, cette théorie rend bien compte du comportement de résistance des métaux magnétiques ne présentant pas de pic. Plus tard Kataoka [55] montrera que les métaux magnétiques présentant un pic est de hauteur finie. Les semiconducteurs magnétiques présentent quant à eux un pic de résistivité à T_c, notons que seuls les semiconducteurs dilués tels que (Ga,Mn)As [14], présente une divergence de résistivité analogue au comportement décrit par la théorie de De Gennes et Friedel.
L'énergie interne du système $< E > \propto \sum_{i \neq j} < \vec{S}_i.\vec{S}_j >$ lorsque la somme est effectuée sur les premiers voisins. Pour la susceptibilité $\chi \propto \sum_{i \neq j} < \vec{S}_i.\vec{S}_j >$ sur toutes les paires de spins. Ceci explique pourquoi la corrélation à courte portée décrira un comportement de résistance analogue à l'évolution de l'énergie interne du système, où seule la dérivée de la résistance dR/dT présente un pic de hauteur finie en accord avec la chaleur spécifique. Alors que l'analogie entre résistance et susceptibilité présentera un pic à T_c. De ce constat, il est difficile d'affirmer qu'une théorie rend mieux compte de la réalité qu'une autre, et semble encore être un point qui mérite un certain nombre d'éclaircissements.

Notre approche par simulation Monte Carlo des semiconducteurs magnétiques présente un comportement de résistance avec un pic de hauteur finie. Comme nous l'avons décrit, la dynamique des spins itinérants à l'intérieur du réseau suit plusieurs mécanismes. A basse température, le système ne fluctue pas, et l'ordre magnétique conduit les spins à se localiser dans les minimums du potentiel périodique. A haute température, le système fluctue fortement et d'un déplacement à l'autre, les électrons se retrouvent dans des zones d'instabilités qui favorisent la diffusion de ces derniers. A la température de transition, le réseau percole et donne naissance à un cluster massif de spins up parsemé de clusters de spins down. Les électrons ne peuvent facilement traverser le système car ils doivent s'y frayer un chemin. Le ralentissement critique accentue le phénomène : les électrons restent longtemps dans des zones énergétiquement favorables.
Nos résultats montrent des similitudes avec de nombreux résultats expérimentaux traitant de la caractérisation des résistivités de semiconducteurs magnétiques dilués [126] et les manganites [94].

L'approche numérique que nous avons réalisée, les résultats et les effets génériques que nous en avons extraits sont comparables en un point aux conclusions d'une étude théorique réalisée par Zarand [126]. Dans ce travail Zarand étudie l'origine du pic de résistance dans

un matériaux ferromagnétique par le biais de la théorie de la localisation. Il attribue l'origine du pic à la localisation des spins itinérants autour des impuretés à la température de transition. Nous observons également aussi la localisation, mais celle-ci est due à une tout autre cause, à celle des fluctuations critiques.

4.3 Films minces antiferromagnétiques

4.3.1 Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous nous sommes concentrés sur l'étude des propriétés de transport dans des films minces ferromagnétiques. Nous avons décrit notre modèle de calcul basé sur la méthode Monte Carlo, et discuté l'influence des différents paramètres initiaux du modèle sur les mécanismes de transport. Cette première partie nous a permis de comprendre les comportements des résistances magnétiques dans le cas de structures ferromagnétiques. Nous allons maintenant nous consacrer à l'étude des mécanismes de transport à travers des réseaux antiferromagnétiques non-frustrés. Nous reviendrons sur les systèmes ferromagnétiques afin de réaliser des comparaisons entre les deux systèmes.
Contrairement aux structures ferromagnétiques pour lesquelles plusieurs théories ont été proposées, les structures antiferromagnétiques n'ont fait l'objet que de peu d'études, dont les principales ont été réalisées par Suezaki et Mori [121], ainsi que Haas [46]. Ces différents travaux concluent sur un comportement de type ferromagnétique dû aux corrélations à courte portée (comportement similaire à celui décrit par la théorie de Fisher et Langer [39]), c'est-à-dire des courbes de résistance magnétique dont seule la dérivée par rapport à la température présente un pic. Nous sommes en désaccord avec ces théories, ainsi qu'Alexander et al. [3], et de nombreux travaux expérimentaux [9][20][62][112][47]. Nous présenterons nos résultats et tenterons de comprendre en quoi les théories de Suezaki, Mori [121] et Haas [46] échouent à expliquer le comportement de résistance dans ces matériaux. Dans un premier temps, afin d'établir les recoupements avec les systèmes ferromagnétiques nous utiliserons le modèle d'Ising et le même jeu de paramètres que dans la partie consacrée aux ferromagnétiques. Dans un second temps, nous étudierons l'effet du champ magnétique sur les propriétés de transport. Pour finir, nous réaliserons une étude comparative entre résultats expérimentaux et résultats de simulations sur un matériau semiconducteur antiferromagnétique à large gap composé de manganèse et de tellurium : MnTe.

4.3.2 Discussion autour d'une courbe de résistance pour un matériau antiferromagnétique

Nous reprenons l'étude d'une courbe de résistance magnétique en utilisant une structure BCC antiferromagnétique. Afin de rendre possible la comparaison entre résistance ferromagnétique et antiferromagnétique nous conservons le même jeu de paramètres que précédemment. A savoir une structure de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$, et les paramètres d'interactions suivant : $I_0 = 2$, $K_0 = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $D = 0.5$. Le champ électrique est fixé à $E = 1$, le nombre d'électrons à $N_0 = 1600$. La constante A du temps de relaxation est placée à $A = 1$ de telle sorte que $\tau_L = 1$ pour $T = 2T_c$. Le temps de rethermalisation du réseau et le nombre de rethermalisations sont respectivement données

par $N_2 = 500$ et $N_3 = 2.10^4$.
Les différentes procédures de mise à l'équilibre ne sont pas modifiées par rapport au cas ferromagnétique. Nous fixons les interactions entre spins du réseau $J = -1$ et commenons par thermaliser la structure sans électrons itinérants. Notons que le signe négatif de la constante d'Ising conduit le réseau à adopter un état fondamental antiferromagnétique (cf. Eq. 3.9. A une température donnée et une fois le système à l'équilibre thermodynamique, nous injectons les spins itinérants et entamons la procédure de transport.

Commenons par noter que le changement de signe de J n'induit pas de changement notable de la dynamique des spins du réseau, la température de transition pour un réseau BCC reste inchangée par rapport au cas ferromagnétique, $T_N = 6.35$ (cf. Fig. 4.27). Dans la théorie des transitions de phase, la corrélation spin-spin se comporte de la même manière à un signe près, pour un ferromagnétique et un antiferromagnétique. Il s'agit de l'invariance par symétrie d'inversion d'un spin sur deux du réseau (transformation de Mattis). Toutefois, l'ordre antiferromagnétique va notablement modifier les propriétés de transport. La courbe de résistance en fonction de la température est présentée en figure 4.29. A basse température, le système peut être assimilé à un cluster antiferromagnétique. Comme dans le cas ferromagnétique, l'énergie thermique va progressivement détruire l'ordre magnétique du réseau. Lorsque la température s'approche de T_N, le système subit un ralentissement critique similaire à celui des systèmes ferromagnétiques. Le réseau percole et présente deux types de clusters antiferromagnétiques de spins antiparallèles. Ces deux types de clusters sont donc antiferromagnétiques mais leur couplage est ferromagnétique [1].

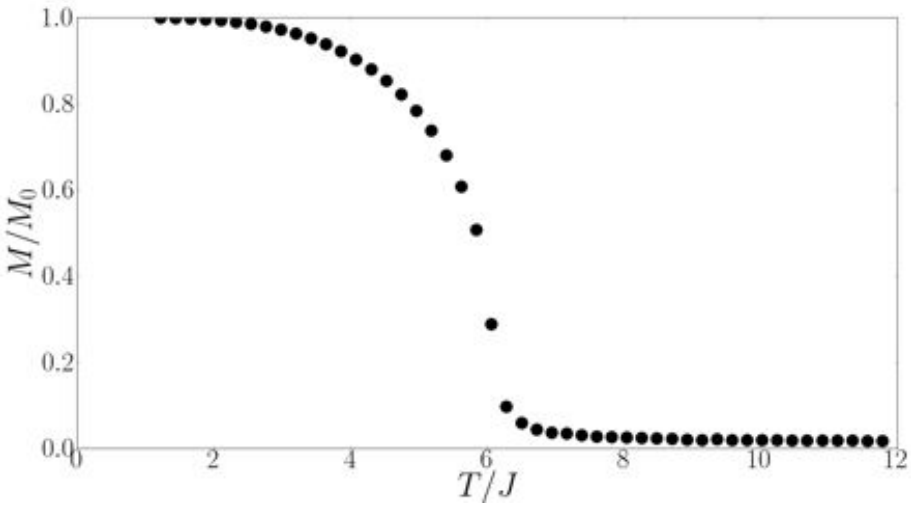

FIGURE 4.27 – *Courbe d'aimantation des sous-réseaux d'une structure BCC antiferromagnétique en fonction de la température, la température de Néel est observée à* $T_N = 6.35$

La jonction de plusieurs clusters antiparallèles forment de petites zones ferromagnétiques qui induisent autour de la température de Néel T_N un phénomène de localisation des spins

1. Dans le cas des systèmes ferromagnétiques, la surface de séparation entre clusters parallèles et antiparallèles se faisait par le biais d'une jonction antiferromagnétique. Dans le cas d'un système antiferromagnétique, cette jonction est inversée et devient ferromagnétique.

itinérants comme le montre la figure 4.28. Bien que ces clusters soient beaucoup moins massifs que ceux observés dans le cas d'un réseau ferromagnétique, ils restent suffisament important pour produire le même phénomène de localisation que nous avons décrit pour les ferromagnétiques. Les courbes de résistance dans le cas antiferromagnétique présentent donc un pic à T_N. Evidemment la hauteur de ce pic est bien moins prononcée que dans le cas ferromagnétique du fait d'un phénomène de localisation moins important (cf. Fig. 4.29).

A haute température, les spins fluctuent et le réseau bascule en phase paramagnétique. Les spins itinérants diffusent de façon identique quelle que soit l'origine magnétique du réseau (ferromagnétique ou antiferromagnétique), les résistances convergent vers une même valeur de saturation.

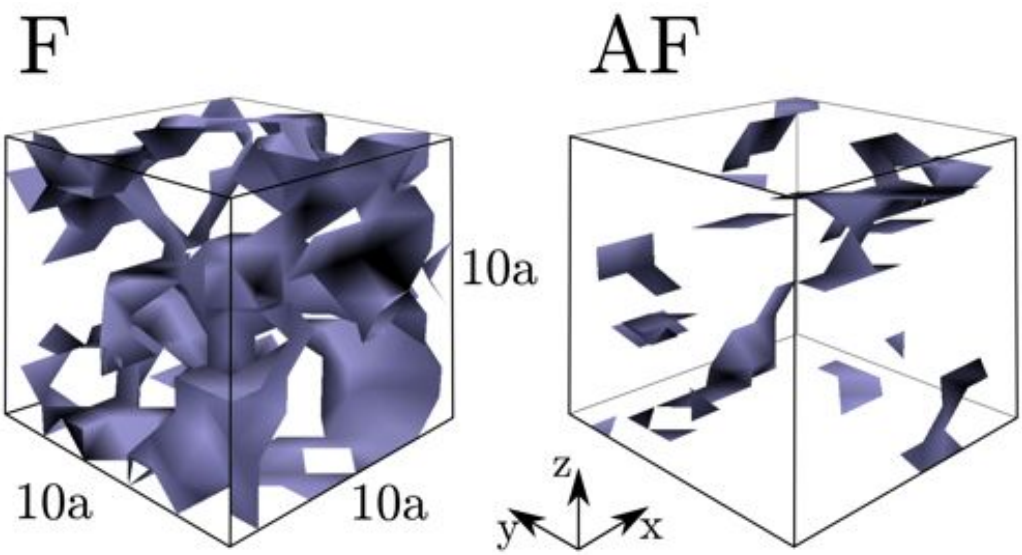

FIGURE 4.28 – *Clusters de spins up (couleur violette) observés dans des structures BCC de tailles $N_x \times N_y \times N_z = 10 \times 10 \times 10a$ à T_c pour le cas ferromagnétique (F), et à T_N pour le cas antiferromagnétique (AF), $T_c = T_N = 6.35$.*

A basse température, on note un écart entre les résistances ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Cet écart est dû au paysage énergétique des antiferromagnétiques. En effet, la structure antiferromagnétique BCC se présente comme un empilement de plans ferromagnétiques up et down le long de l'axe z (cf. Fig. 4.30). L'électron pour se déplacer va préférentiellement suivre l'un des plans ferromagnétiques sans pouvoir traverser les plans antiparallèles qui le jouxtent. La mobilité de l'électron est réduite, la résistance augmente. Le fait que le magnétisme des antiferromagnétiques ne soit pas isotrope va rendre le paramètre D_1 (la sphère d'interaction électron-réseau) tout à fait déterminant sur les mécanismes de transport à basses températures. En effet, si dans le cas des ferromagnétiques D_1 permettait d'inclure plus ou moins de spins up du réseau dans la sphère d'interaction, c'est-à-dire d'en abaisser la valeur moyenne, l'effet de D_1 pour les antiferromagnétiques va être radicalement différent.

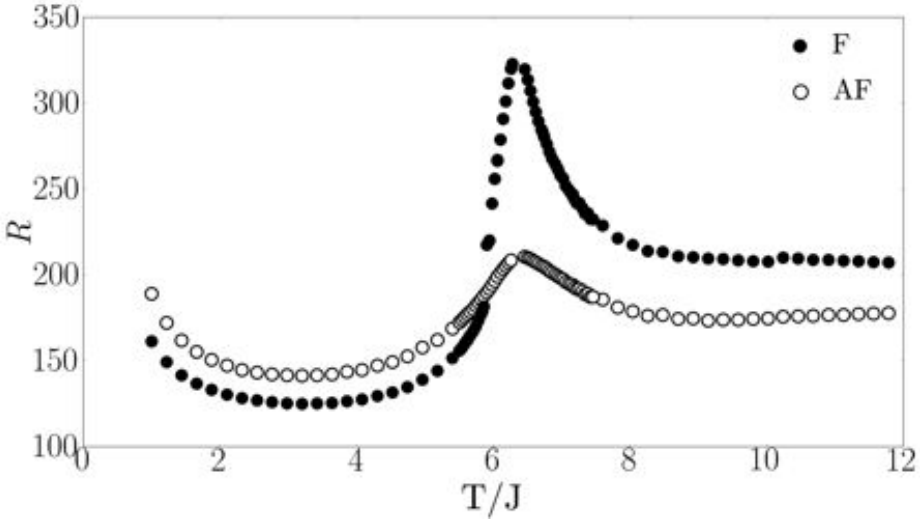

FIGURE 4.29 – *Courbes de résistance en fonction de la température pour une structure BCC ferromagnétique (ronds noirs), et antiferromagnétique (ronds blancs).*

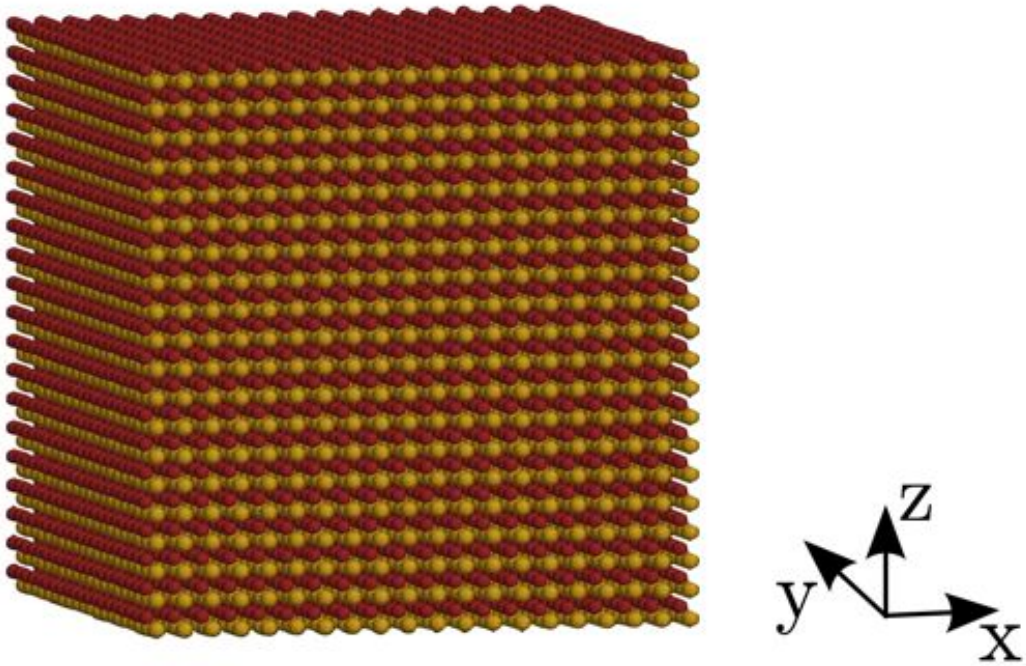

FIGURE 4.30 – *Système BCC antiferromagnétique de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 20a$. Les points jaunes correspondent aux spins up du réseau, les rouges aux spins down.*

4.3.3 Effet de D_1 sur les mécanismes de transport à basse température et autour de la température de Néel

Dans le cas d'un système ferromagnétique, il résulte de l'augmentation (diminution) du rayon d'interaction électron-réseau D_1, une augmentation (diminution) du nombre de spins parallèles du réseau en interaction avec un spin itinérant, figure : 4.31. La

conséquence de la variation du rayon D_1 pour les ferromagnétiques est une variation de l'énergie resentit par un spin itinérant avec les spins du réseau. Lorsque D_1 augmente, l'énergie d'interaction diminue. Pour les antiferromagnétiques, la situation est différente : il résulte de la variation de D_1 une oscillation de l'ensemble des grandeurs mesurées, liées à la différence du nombre de spins du réseau parallèles et antiparallèles pris en compte dans la sphère de rayon D_1. Nous notons cette grandeur $\Delta N_{\uparrow\downarrow} = N_\uparrow - N_\downarrow$

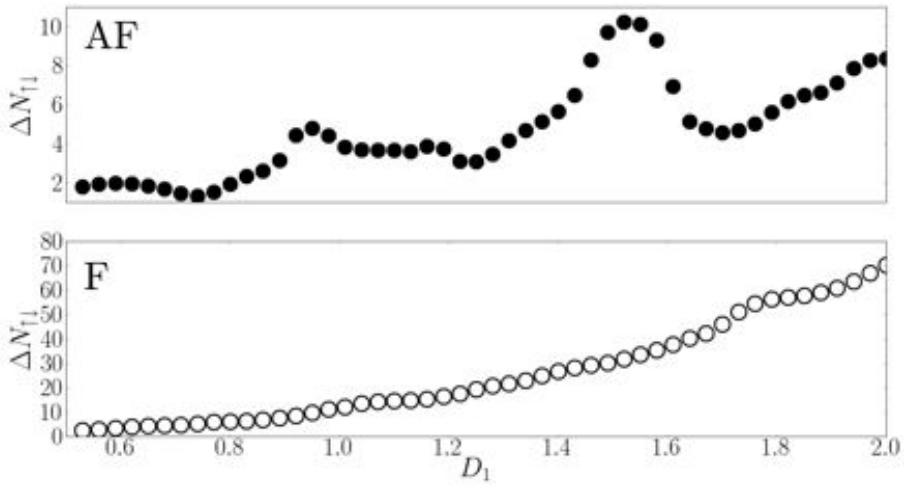

FIGURE 4.31 – AF : *Différence du nombre moyen de spins up et down* $\Delta N_{\uparrow\downarrow} = N_\uparrow - N_\downarrow$ *interagissant avec l'électron au centre de la sphère de rayon* D_1 *dans un réseau antiferromagnétique à la température* $T = 1$. F : *Différence du nombre moyen de spins up et down* $\Delta N_{\uparrow\downarrow} = N_\uparrow - N_\downarrow$ *interagissant avec l'électron au centre de la sphère de rayon* D_1 *pour un réseau ferromagnétique à la température* $T = 1$.

A basse température

Nous nous plaçons à $T = 1$ pour observer les oscillations de plusieurs grandeurs liées au transport de spins. Nous présentons dans la figure 4.32 l'évolution de la résistance R, de la vitesse v_x des électrons le long de l'axe x, de l'énergie d'interaction électron-réseau : E_{e-i}, et de la différence du nombre de spins parallèles et antiparallèles $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ en fonction de D_1. Nous pouvons relier le comportement de l'ensemble des grandeurs de la façon suivante :
Lorsque $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ présente un maximum, la moyenne du nombre de spins parallèles du réseau en interactions avec les spins itinérants est maximum. Or, les spins itinérants minimisent leurs énergies par le biais d'interactions ferromagnétiques avec le réseau. Plus un électron interagit avec un grand nombre de spins parallèles, et plus l'énergie E_{e-i} sera faible. En conséquence, une valeur maximum de $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ correspond à une valeur minimum de l'énergie d'interaction E_{e-i}. Nous avons déjà souligné l'importance des interactions des spins itinérants avec le réseau, à l'origine des formes des résistances magnétiques. Plus cette énergie est faible, plus les électrons sont liés au réseau, et moins ils auront tendance à diffuser. On note que lorsque E_{e-i} est minimum, v_x est minimum. Enfin, plus v_x est faible, et plus le matériau résiste aux déplacements des charges, la résistance est donc

maximum. La réciproque de ce raisonnement est vrai.

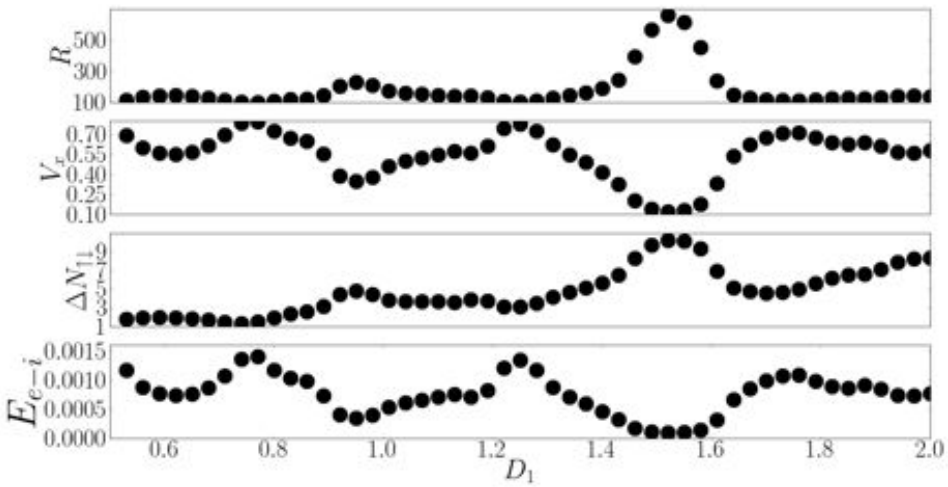

FIGURE 4.32 – *Différentes quantités liées au transport en fonction de D_1 à la température $T = 1$ pour un réseau antiferromagnétique. De haut en bas, nous présentons : la résistance R, la vitesse moyenne v_x des électrons le long de l'axe x, la différence moyenne du nombre de spins up et down en interaction avec un spin itinérant donné $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ et l'énergie d'interaction des spins itinérants avec le réseau E_{e-i}.*

La résistance ferromagnétique présente de légères oscillations en fonction de D_1, figure : 4.33. Il faut se souvenir que nos simulations sont ici réalisées à basse température. Nous avons décrit précédemment que les électrons se localisent dans les minimums du potentiel périodique, dans lesquels les électrons se retrouvent piégés faute d'une énergie thermique et d'un champ électrique suffisament intense pour les en extraire. La variation de D_1 modifie la forme des puits perçue par les électrons, cependant cette variation est douce car l'augmentation de D_1 a pour effet d'inclure toujours plus de spins parallèles dans l'interaction qu'entretiennent les électrons avec le réseau. L'énergie d'interaction décroît de façon monotone avec l'augmentation de D_1 (cf. Fig. 4.34). En comparaison, la variation de D_1 dans un réseau antiferromagnétique a pour effet d'inclure plus ou moins de spins up et down ayant pour effet de faire osciller l'énergie.

Dans les antiferromagnétiques, l'anisotropie magnétique joue un rôle déterminant avec la valeur de D_1 sur les trajectoires empreintées par les électrons dans le réseau. A basse température, lorsque le réseau est ordonné, nous pouvons observer un résultat tout à fait surprenant en ce qui concerne les trajectoires de transport des électrons à travers la structure. Sur la figure 4.35 nous constatons qu'à $T = 1$, les électrons se propagent le long des plans des sous-réseaux de spins antiparallèles pour $D_1 = a$, alors que pour $D_1 = 0.25a$ les électrons se propagent le long des plans de spins parallèles. Ce résultat est appuyé par les visualisations des isosurfaces d'énergie. Imaginons pour simplifier qu'un électron se propage par sauts d'un site du réseau à un autre. Pour un D_1 inférieur à la distance premier voisin, l'électron n'interagit qu'avec un site à la fois. Cet électron se déplace à proximité d'un sous-réseau de spin parallèles afin de minimiser son énergie. Cependant, si D_1 est suffisament grand pour inclure un second voisin dans sa sphère

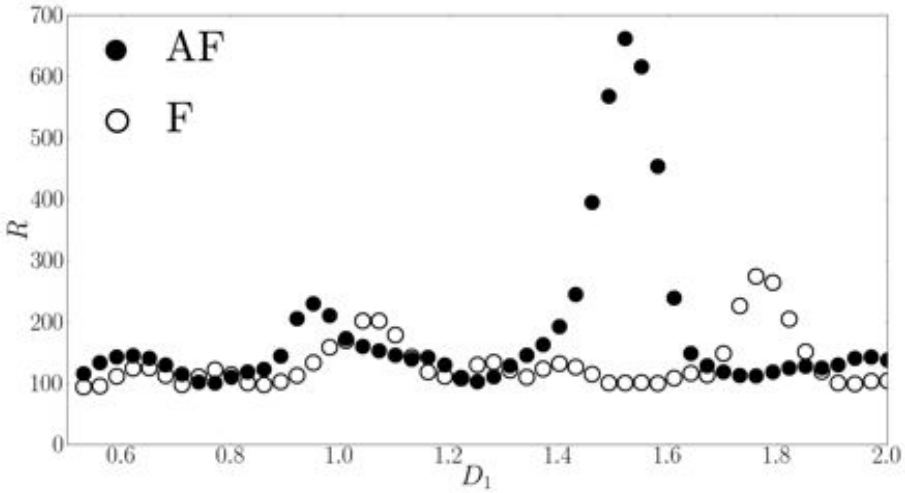

FIGURE 4.33 – *Résistance ferromagnétique (ronds blancs) et antiferromagnétique (ronds noirs) en fonction de D_1 à $T = 1$.*

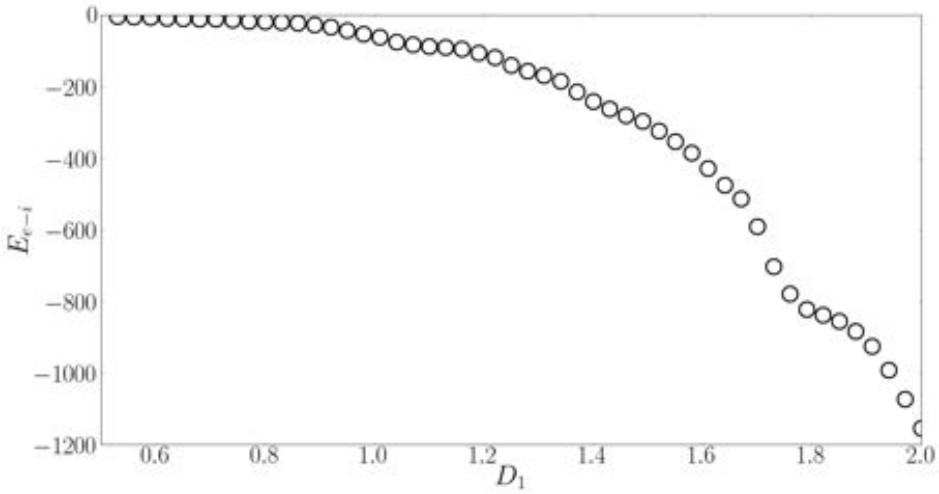

FIGURE 4.34 – *Variation de l'énergie moyenne d'interaction des électrons avec le réseau ferromagnétique en fonction de D_1 à une température $T = 1$.*

d'interaction. L'électron se déplacera sur un plan antiparallèle du sous-réseau, car même si cet électron est en interaction directe avec un spin antiparallèle, ce dernier aura huit interactions ferromagnétiques avec ses seconds voisins, correspondant à la position de minimum d'énergie. L'augmentation du rayon D_1 alternera les positions des trajectoires des spins sur l'un ou sur l'autre des sous-réseaux. A la limite de très grands D_1 où le réseau sera moyenné sur de si grandes distances, qu'aucune oscillation ne pourra être détectée sur les paramètres mesurés.

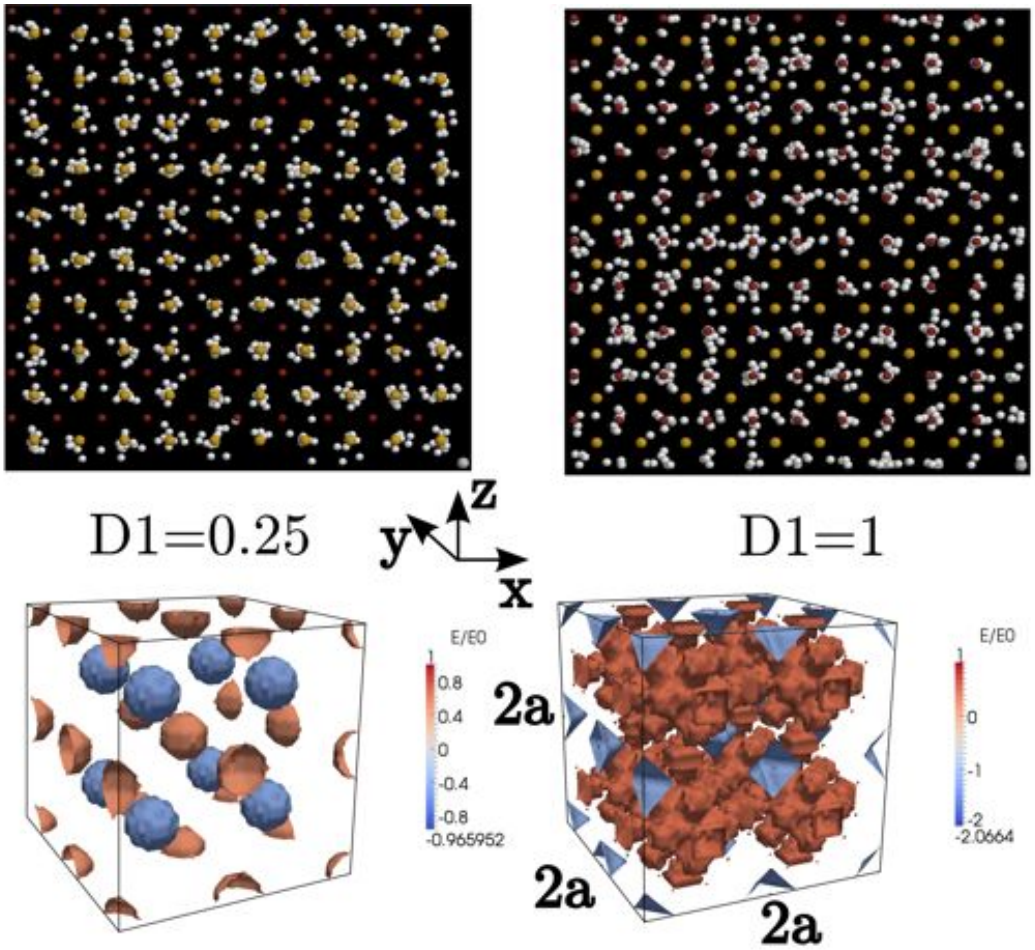

FIGURE 4.35 – *En haut à gauche, visualisation des sous-réseaux occupés par les électrons itinérants en fonction du rayon D_1. Pour de faibles rayons $D_1 = 0.25a$, les spins occupent le sous-réseau up en haut à gauche, en bas à droite nous représentons les isosurfaces d'énergie dans une boîte de volume $a \times a \times a$. Les plans du sous-réseau up correspondent au zones de basses énergies (surfaces bleues). A droite, en haut et en bas, les électrons occupent les plans du sous-réseau de spins down pour $D_1 = a$, les isosurfaces d'énergie soulignent que les positions de basses énergies (surfaces bleues) correspondent à ces plans.*

Autour de la température de Néel

Autour de la température de transition, l'effet de D_1 n'a pas d'influence sur la hauteur du pic de résistance comme le montre la figure 4.36. Cependant, l'augmentation de D_1 a tendance à affiner sa forme. Ce phénomène se comprend en reprenant l'argument de localisation. Si la sphère d'interaction D_1 est petite, l'effet de localisation se produira sur de petits clusters parallèles du réseau. Dans ce cas la localisation se produit dès leurs formations et jusqu'à leurs disparitions, le pic de résistance est large. Au contraire, une grande valeur de D_1 ne sera pas ou peu sensible à de petits clusters, car l'électron explore le réseau sur de plus grandes distances. L'effet de localisation ne se fera ressentir qu'à des températures très voisines de T_N.

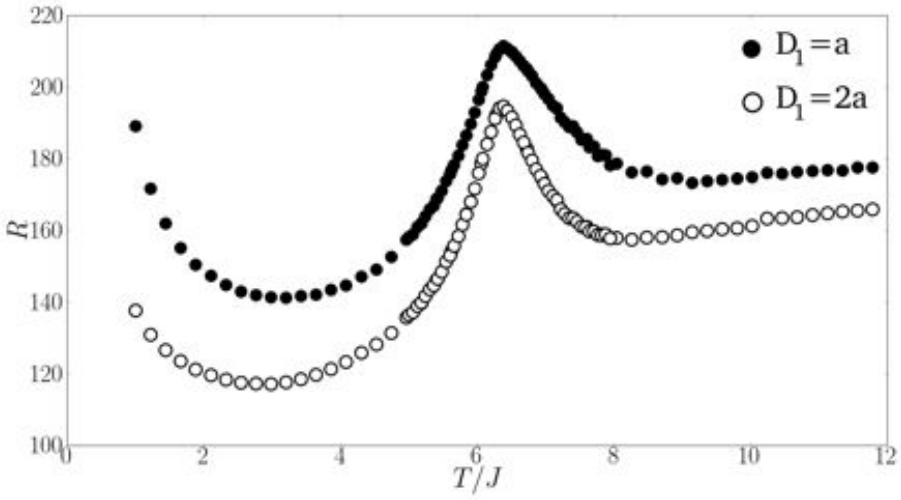

FIGURE 4.36 – *Courbes de résistance en fonction de la température pour $D_1 = a$ (ronds noirs) et $D_1 = 2a$ (ronds blancs).*

4.3.4 Influence du temps de relaxation sur le pic de résistance à la température de Néel

La comparaison des courbes de résistance avec et sans prise en compte du ralentissement critique du réseau est particuliairement intéressante. Nous comparons ici les résultats d'un système BCC antiferromagnétique. Les paramètres restent les mêmes que précédemment. Le système est de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20a \times 20a \times 20a$, les interactions entre spins du réseau sont fixées à $J = -1$, $I_0 = 2$, $K_0 = 0.5$, $D = 0.5$, $D_1 = D_2 = a$, $E = 1$, enfin la constante du temps de relaxation est choisie tel que $A = 1$.

A basse température, les deux courbes se supperposent pour les mêmes raisons que précedemment : le système est ordonné et l'énergie thermique est trop faible pour détruire l'ordre magnétique du réseau. Le paysage magnétique du réseau n'est pas modifié dans le temps, le temps de relaxation n'a aucune influence sur la résistance.

A haute température, les spins du réseau fluctuent fortement, il faut tenir compte du temps de relaxtion τ_L qui favorise la diffusion des spins itinérants et reduit la résistance par rapport au cas où nous n'en tenons pas compte.
Les mécanismes de diffusion pour les hautes et les basses températures ne changent pas comme dans le cas ferromagnétique.

La forme de la résistance entre les deux cas étudiés devient particulièrement intéressante autour de la température de Néel. Dans le cas de la prise en compte du temps de relaxation, la courbe de résistance présente un pic, la résistance se comporte tel que l'ont décrit de Gennes et Friedel [24] dans leur travaux sur la résistance magnétique. Dans le cas inverse, la courbe se comporte comme l'ont suggéré Fisher et Langer [39] ainsi que Haas pour les antiferromagnétiques [46], c'est-à-dire une courbe de résistance ne présentant pas de pic, mais dont seule la dérivée en température en présente un.

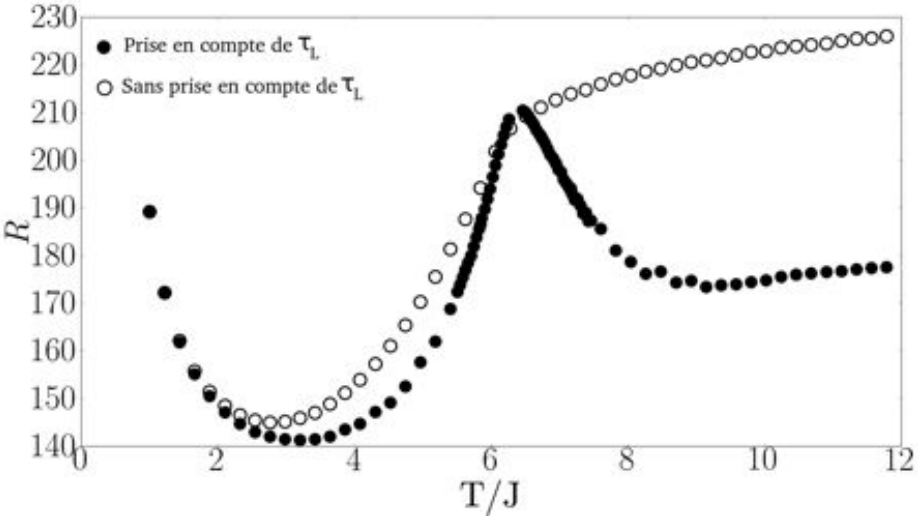

FIGURE 4.37 – *Courbes de résistance pour une structure BCC antiferromagnétique avec (ronds noirs), et sans prise en compte du temps de relaxation (ronds blancs).*

4.3.5 Discussion

Deux travaux théoriques traitent du comportement de la résistance magnétique dans les matériaux antiferromagnétiques. Le modèle de Haas propose d'utiliser un faible potentiel d'interaction électron-réseau afin de pouvoir être traité par la théorie des perturbations. Comme pour notre modèle, les porteurs ne contribuent pas à l'ordre magnétique du réseau (ce travail exclut les semiconducteurs dilués dans lesquels les spins itinérants modifient l'ordre magnétique du réseau). Le reste du travail est construit autour de l'utilisation de l'équation de Boltzmann, en considérant la probabilité de diffusion comme la fonction de corrélation des spins du réseau. Ce modèle révèle deux comportements distincts selon le type de magnétisme des structures. Pour les ferromagnétiques, le modèle prédit un pic de résistance à T_c. Cependant, pour les antiferromagnétiques, le modèle ne présente pas de pic. Suezaki et Mori [121] s'intéresse à cette même question. Dans leur travail, les auteurs s'inspirent des modèles de De Gennes et Friedel, et de Fisher et Langer. Ils traitent le problème en utilisant la diffusion des électrons par les fluctuations thermiques des spins du réseau.
Nous avons repris ce travail par le biais de l'équation de Boltzmann [97]. La procédure consiste dans un premier temps à utiliser les propriétées d'un réseau thermalisé par le biais de la procédure Monte Carlo, et d'en extraire grâce à l'algorithme de Hoshen-Kopelman [51] la distribution des clusters ferromagnétiques, en tenant compte de leurs tailles et de leurs nombres. Cette distribution est alors utilisée comme probabilité de diffusion dans l'équation de Boltzmann, et comparé à la résistance d'un matériau antiferromagnétique "MnTe", le même exemple utilisé par Haas [46], Nous y reviendrons dans le chapitre suivant. Cette méthode rend compte de l'existence d'un pic de résistance à T_N, comme les résultats des simulations directes Monte Carlo. Il est à noter qu'expérimentalement de nombreuses études soulignent l'existence d'un pic de résistance à T_N [57] y compris pour "MnTe" [47], quelques exemples peuvent être observés sur la figure 4.38. La question est donc de comprendre pourquoi les théories de Haas, Suezeki et Mori, reposant sur l'utilisation du champ moyen ne rendent pas compte d'un pic de résistance, alors

que le traitement du transport par l'équation de Boltzman en utilisant la distribution de clusters comme probabilité de diffusion en présente un. La différence fondamentale entre ces modèles tient dans l'utilisation du champ moyen. Avec le champ moyen, on moyenne des grandeurs du réseau sans tenir compte en détail des fluctuations critiques du système. Or nous avons souligné l'importance de ce point en ce qui concerne l'origine du pic [126][128][67][68] induit par la localisation des porteurs à la température de transition. Il est d'autant plus important de traiter avec précaution l'état magnétique du réseau pour les systèmes antiferromagnétiques qui présentent de petits clusters. En ce qui concerne les résultats obtenus par l'algorithme de transport, nous avons distingué deux cas dépendant de la prise en compte ou non du temps de relaxation du réseau. Dans le cas où nous ne tenons pas compte de τ_L, les résistances antiferromagnétiques ne présentent pas de pic. Dans le cas contraire, les résistances en présentent un. Même si la cause semble différente de celle de Haas, la non prise en compte du temps de relaxation ne permet pas aux électrons une exploration détaillée de l'environnement magnétique, aboutissant à un résultat biaisé de la résistance magnétique. Une perspective intéressante consisterait à traiter ce problème par une méthode similaire à celle de Zarand [126] et de déterminer les courbes directement par la théorie de la localisation.

4.4 Conclusion

Nous avons présenté dans la première partie de ce chapitre les résultats de simulations : les résistances magnétiques d'un système ferromagnétique. Nous avons décrit l'influence de chaque paramètre prenant place dans le jeu d'interactions de notre modèle, et avons souligné l'importance fondamentale de l'interaction des spins itinérants avec les spins du réseau sur les formes des résistances magnétiques. Rappelons en les principaux points :

A basse température, le réseau porte un ordre ferromagnétique. Il résulte de cet ordre un potentiel périodique composé de minimas d'énergie dans chaque maille du réseau, dans lesquels les électrons itinérants se retrouvent piégés. La contribution des fortes interactions électron-ion ainsi que les interactions électron-électron induisent un gel des électrons, qui présentent à très basse température un ordre spatial. Faute d'une énergie thermique et d'un champ électrique suffisament élevés pour s'extraire des minimas d'énergie, les électrons ne conduisent que très peu le courant, donnant lieu à une augmentation de la résistance quand $T \to 0$. L'augmentation de l'énergie thermique brise légèrement l'ordre magnétique du réseau. Les électrons interagissent avec les spins antiparallèles locaux qui jouent le rôle de centres diffuseurs. La résistance décroît quand T tend vers zéro.

Autour de la température de transition, le réseau subit un ralentissement critique. Le système est composé d'un enchevètrement de clusters massifs up et down. Les électrons par le biais de leurs interactions ferromagnétiques avec les spins up viennent se localiser dans les clusters up, et donner naissance à un pic prononcé de résistance autour de T_c.

Au-delà de la température de transition, les clusters fondent, et le système fluctue avec l'augmentation de la température. Les fluctuations du réseau favorise alors la diffusion des spins itinérants, la résistance décroît et sature.

Lorsque $T \gg T_c$, le système est très désordonné, la diffusion est maximum et la résistance décroît vers une constante.

Des discussions précédentes, nous concluons que la résistance R du modèle se comporte

avec un pic à T_c dont les caractéristiques dépendent des paramètres physiques. Le pic de résistance est en accord qualitatif avec les expériences réalisées avec certains semiconducteurs magnétiques et systèmes désordonnés. Dans ce chapitre d'exploitation, nous avons cherché à mettre en évidence les effets génériques du transport de spins afin de comprendre la dépendance de la résistance magnétique avec la température. Cette première partie nous a enfin permis d'étendre notre compréhension à des systèmes plus compliqués tels que les antiferromagnétiques, et nous permettra un peu plus tard de comparer les résultats de notre modèle aux résultats expérimentaux réalisés sur une structure réelle.

Dans un second temps, nous avons présenté nos résultats de simulation concernant le transport de spins à travers un réseau BCC de spins localisés en interactions antiferromagnétiques. La comparaison avec cette même structure dans l'état ferromagnétique nous a permis d'identifier des mécanismes de transport caractéristiques pour les deux types de magnétisme. Contrairement au cas ferromagnétique, à basse température, le rayon de la sphère d'interaction D_1 permet d'inclure plus ou moins de spins up et down dans la sommation des interactions électron-réseau. Il en résulte que l'ensemble des paramètres de transport présentent un comportement oscillatoire fonction de D_1. Nous avons interprété et recoupé l'évolution de ces grandeurs (R, v_x, E_{e-i}, $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$), en fonction de D_1. Pour synthétiser nos propos, nous avons mis en évidence que les propriétés de transport des spins itinérants sont principalement liées à l'ordre magnétique du réseau. Or, l'ordre magnétique des réseaux antiferromagnétiques rend la diffusion des spins particulièrement sensible au paramètre D_1.
A plus haute température, autour de T_N, nous constatons la présence d'un pic sur les courbes de résistances magnétiques dans le cas où nous tenons compte du temps de relaxation du réseau. Comme pour les résultats des ferromagnétiques, l'interprétation par les clusters explique la présence du pic par le phénomène de localisation des porteurs. Dans le premier cas (ferromagnétique), on observe autour de T_c la formation de clusters alternés up et down qui conduisent au phénomène de localisation des porteurs. Dans le cas antiferromagnétique, nous avons observé ce même phénomène. Toutefois, les clusters ferromagnétiques du réseau sont de tailles réduites et immergés dans un milieu antiferromagnétique réduisant considérablement le phénomène de localisation. Le pic résultant est donc moins prononcé que pour les systèmes ferromagnétiques.
Toujours autour de T_N, mais dans le cas ou nous ne tenons pas compte de la relaxation du réseau, nous observons la disparation du pic. La résistance se comporte comme l'on suggéré Suezeki, Morri [121] et Haas [46]. Les différentes théories de ces auteurs reposent sur le traitement par l'équation de Boltzmann en utilisant comme probabilité de diffusion la corrélation entre spins du réseau. Or cette corrélation est préalablement déduite d'un traitement par champ moyen, les grandeurs sont moyennées sur les fluctuations, ce qui efface le ralentissement critique qui est à l'origine du pic.
En conclusion, l'étude des films minces magnétiques nous a permis d'apporter un nouveau regard en ce qui concerne les mécanismes qui gouvernent les comportements de la résistance magnétique. A cet égard, l'interprétation par la structure de clusters que nous avons suggéré, s'applique aux deux structures magnétiques, ferromagnétique et antiferromagnétique, et nous permet de proposer une autre description physique de la singularité de résistance.

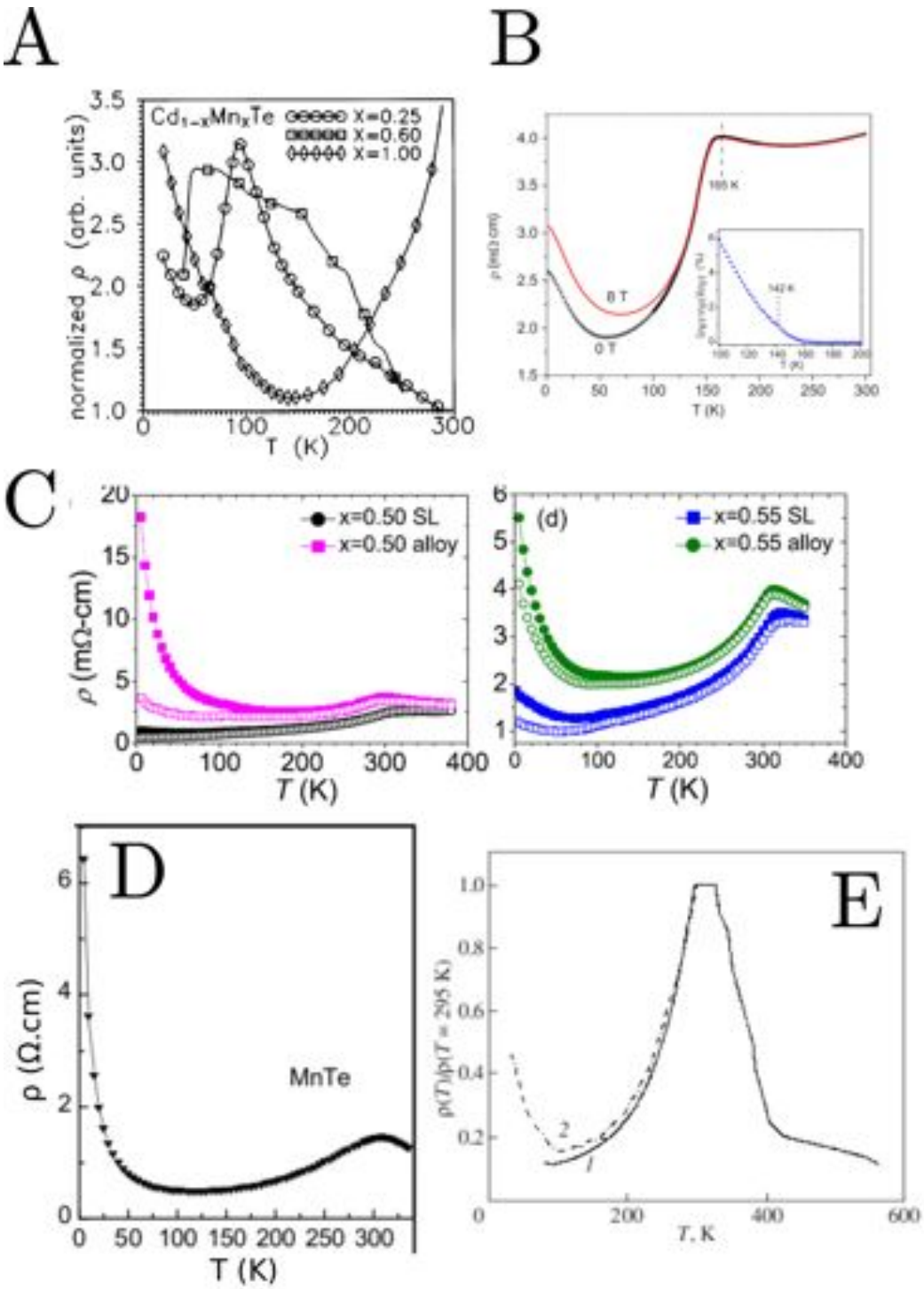

FIGURE 4.38 – A. *Courbes de résistivités fonction de la température pour différentes stœchiométrie du matériau antiferromagnétique* $Cd1 - xMnxTe$ *[20].* B. *Courbes de résistivités fonction de la température, mesurées par McGuire et al. [73] sur un échantillon de* $LaFeAsO$. C. *Courbes de résistivités fonction de la température, mesurées par McGuire et al. [100] sur un échantillon de* $(1-x)LaMnO_3/(x)SrMnO_3$ *pour différentes stœchiométries.* D. & E. *Respectivement les courbes de résistivités de* $MnTe$ *en fonction de la température, tirées des l'articles de He et al. [47] et de Efrem et al. [30].*

Chapitre

5 Simulation d'un système réel $MnTe$, comparaison expérimental/théorique

5.1 Semiconducteur antiferromagnétique MnTe.

Nous réalisons maintenant une simulation qui a pour vocation de comparer des résultats issus de mesures expérimentales avec nos résultats de simulations. Nous avons choisi comme matériau un cristal de manganese et tellurium $MnTe$. Ce semiconducteur a été largement étudié dans les années 1960, cependant les difficultés liées à l'élaboration des échantillons, et son caractère fortement antiferromagnétique, ont fait de lui à cette époque un matériau anecdotique. Depuis la découverte de la GMR et le développement de la spintronique, $MnTe$ connaît un regain d'intérêt [48] pour ses propriétés magnétiques persistentes à haute température. Par exemple, son fort antiferromagnétisme et sa haute température de Néel $T_N \sim 310K$ [9][20][62][112][47] est idéale dans le cadre de technologie telle que les valves de spins. De plus, son élaboration peut être réalisée par epitaxie permettant une production aisée de structure en multicouches.

Le matériau pur $MnTe$ peut cristalliser sous deux formes, zinc-blende, ou hexagonale de type $NiAs$ [101]. Nous orientons notre étude vers cette dernière, dont nous présentons une maille élémentaire en figure 5.1. Ce semiconducteur non-dégénéré est de type p, avec une concentration typique de porteurs de $N_0 = 10^{18} cm^{-3}$, et un gap de l'ordre de $E_g = 1.27$ eV à température ambiante. Les paramètres de la structure sont les suivants $a = 4.158\mathring{A}$ et $c = 6.71\mathring{A}$.
Les propriétés magnétiques de la structure sont principalement déterminées par les interactions d'échange entre les spins des ions Mn, $|\vec{S}_{Mn}| = 5/2$ et la constante d'anisotropie uniaxiale D_{zz}. Deux articles mentionnent les valeurs expérimentales de ces constantes de couplage, nous les présentons dans le tableau 5.1. La première utilise les mesures de dispersions d'ondes de spins [48], la seconde [80] les résultats d'une expérience de diffusion Raman, dans laquelle deux modes de magnons sont utilisés pour déterminer les constantes de couplage.

Les spins de Mn à l'origine du magnétisme de la structure s'alignent parallèlement sur le plan xy, les interactions sur ces plans ferromagnétiques sont imposées par une constante de couplage $J_2 > 0$. La structure présente cependant un empilement de plans ferromagnétiques antiparallèles le long de l'axe z dû aux interactions entre premiers voisins $J_1 < 0$, et troisièmes voisins $J_3 < 0$ des deux plans adjacents.

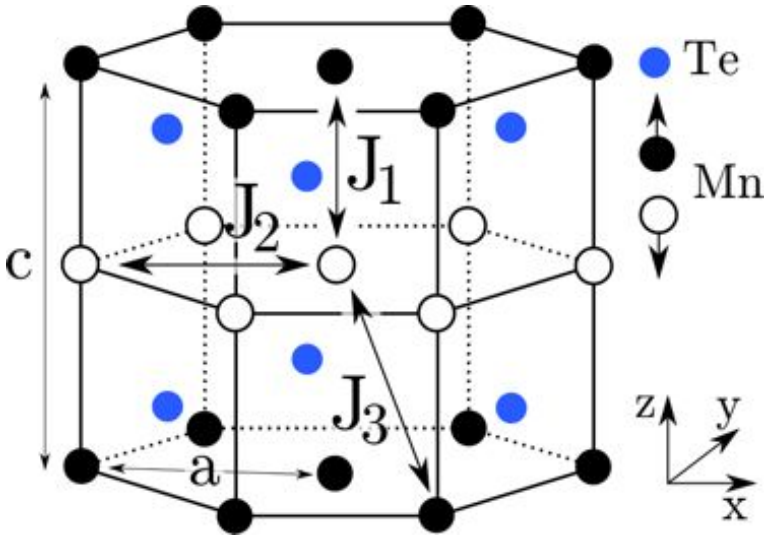

FIGURE 5.1 – *Structure de type $NiAs$ du semiconducteur $MnTe$. Les cercles bleus correspondent aux sites occupés par le tellurium Te non-magnétique, les cercles noirs et blancs aux sites occupés par les ions de manganèse Mn, respectivement de spins up et down. Les premiers voisins interagissent par l'intégrale d'échange J_1, les seconds voisins par J_2 et les troisièmes voisins par J_3.*

TABLE 5.1 – Valeurs des constantes de couplage pour $MnTe$

J_1/k_B (K)	J_2/k_B (K)	J_3/k_B (K)	D_{zz} (K)	référence
-21.5	0.67	-2.87	0.12	Hennion et al . [48]
-16.7	2.55	-0.28	X	S. R. Mobasser et al. [80]

5.2 Etude du matériau $MnTe$ par utilisation de l'équation de Boltzmann et de la distribution de clusters

D'UN points de vu numérique, notre attention s'est portée sur ce matériau pour plusieurs raisons. La première est historique, ce même matériau a été étudié par Haas [46], dont la théorie de transport dans les semiconducteurs antiferromagnétiques prédit l'absence du pic de résistivité à la transition. Nos résultats précédents sont en désaccord avec cette conclusion et nous avons souhaité reprendre l'étude de ce même cas mais avec toutes les données expérimentales disponibles de ce matériau. Pour des raisons pratiques, la densité de porteurs dans $MnTe$ est faible $N_0 = 10^{18} cm^{-3}$ ce qui va nous permettre de négliger les interactions entre porteurs. Enfin, le couplage entre les spins du réseau est très élevé devant les interactions électron-réseau, ce qui nous permet de faire l'hypothèse qu'un spin itinérant ne peut modifier l'état magnétique du réseau.

La première méthode que nous avons utilisée pour déterminer les propriétés de transport du matériau $MnTe$ a consisté à utiliser l'équation de Boltzmann, en traitant les clusters de spins du réseau comme des centres diffuseurs, où la probabilité de diffusion de l'équation de Boltzmann est prise comme la distribution de clusters du réseau [1].
La méthodologie et les hypothèses que nous faisons sont les suivantes :
comme précédemment, nous commençons par thermaliser un réseau par le biais de la

méthode Monte Carlo Métropolis sur réseau décrite au chapitre 3. Nous utilisons le Hamiltonien de Heisenberg suivant :

$$\mathcal{H} = J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i.\vec{S}_j + A \sum_{<i,j>} \vec{S}_i^z.\vec{S}_j^z \tag{5.1}$$

où A représente l'amplitude de l'anisotropie uniaxiale. Ceci signifie que pour $A = 0$, le Hamiltonien correspond au modèle de Heisenberg isotrope, alors que pour $A \to \infty$ le Hamiltonien correspond au modèle d'Ising.
Une fois l'équilibre thermodynamique atteind, nous utilisons l'algorithme de Hoshen-Kopelmann [**?**], qui va nous permettre de déterminer le nombre η, et la taille ξ des clusters de spins présents sur le réseau, à la température T de simulation. Nous nous plaçon pour ce travail en régime diffusif et considérerons des bandes paraboliques du modèle $s - d$. Afin d'utiliser l'approximation de Born, nous fixons un faible potentiel d'interaction entre les clusters de spins et les électrons de conduction. Enfin, nous supposerons que la durée de vie des clusters est grande devant le temps de relaxation des électrons. Ce dernier point se justifie par le ralentissement critique de la dynamique des spins du réseau qui diverge à T_c (cf. chapitre 4).

Nous commençons par rappeler l'équation de Boltzmann où f représente la fonction de distribution des électrons itinérants dans le cas d'un champ électrique $\vec{E}$ uniforme.

$$\left(\frac{\hbar\vec{k}.e\vec{E}}{m}\right)\left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \tag{5.2}$$

Avec f^0 la fonction de Fermi-Dirac à l'équilibre, $\vec{k}$ le vecteur d'onde, e la charge, m la masse et ϵ l'énergie des électrons. Nous utilisons ensuite l'approximation du temps de relaxation :

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t}\right)_{coll} = -\left(\frac{f_k^1}{\tau_k}\right), \qquad f_k^1 = f_k - f_k^0 \tag{5.3}$$

où τ_k représente le temps de relaxation. Nous supposons alors les collisions élastiques, c'est-à-dire que $k = k'$. Le terme de collision s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int \left[w_{k',k}(f_{k'}^1 - f_k^1)\right] d\vec{k'} \tag{5.4}$$

avec Ω le volume du système, $\omega_{k',k}$ la probabilité de transition entre états $\vec{k}$ et $\vec{k'}$. A l'aide des expressions 5.3 & 5.4, nous obtenons :

$$\left(\frac{1}{\tau_k}\right) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int [w_{k',k}(1-\cos\theta)] \times \sin(\theta)k'^2 dk' d\theta d\phi$$

où θ et φ sont les angles formés entre les vecteurs $\vec{k}$ et $\vec{k'}$ en coordonées sphériques. Nous utilisons alors la règle d'or de Fermi afin d'exprimer $\omega_{k',k}$.

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int [\omega_{k,k'}(1-cos(\theta))]sin(\theta)k'^2 dk' d\theta d\phi \omega_{k,k'} \tag{5.5}$$

$$= \frac{(2\pi)m}{\hbar^3 k}| < k'|J(r)|k > |^2 \delta(k'-k) \tag{5.6}$$

$J(r)$ est l'intégrale d'échange entre les spins de conduction et les spins du réseau. Nous définissons $J(r) \equiv V_0 e^{-r/\xi}$, avec V_0 l'amplitude des interactions, et ξ la taille moyenne des clusters. Finallement le calcul mène à l'expression du temps de relaxation suivante :

$$\frac{1}{\tau_{k_f}} = \frac{32V_0^2 m\pi}{(2k\hbar)^3}\eta\xi^2\left[1 - \frac{1}{1+(2\xi k_f)^2} - \frac{(2\xi k_f)^2}{[1+(2\xi k_f)^2]^2}\right] \tag{5.7}$$

avec $\vec{k}_f$ le vecteur d'onde de Fermi. Nous définissons alors les expressions de mobilité et de résistivité :

$$\mu_x = \frac{e\hbar^2}{3m^2}\frac{\sum_k k^2(\partial f_k^0/\partial\epsilon)\tau_k}{\sum_k f_k^0} \tag{5.8}$$

$$R = \frac{\eta 4V_0^2 m^2 \pi k_f \xi^2}{ne^2\hbar^3}\left[\frac{4\xi^2}{1+4\xi^2 k_f^2}\right]^2 \tag{5.9}$$

Nous traçons les courbes des résistivités théoriques pour les cas d'un semiconducteur dégénéré et non-dégénéré. Les résultats théoriques sont renormalisés par rapport à la courbe expérimentale donnée par Chandra et al. [20].

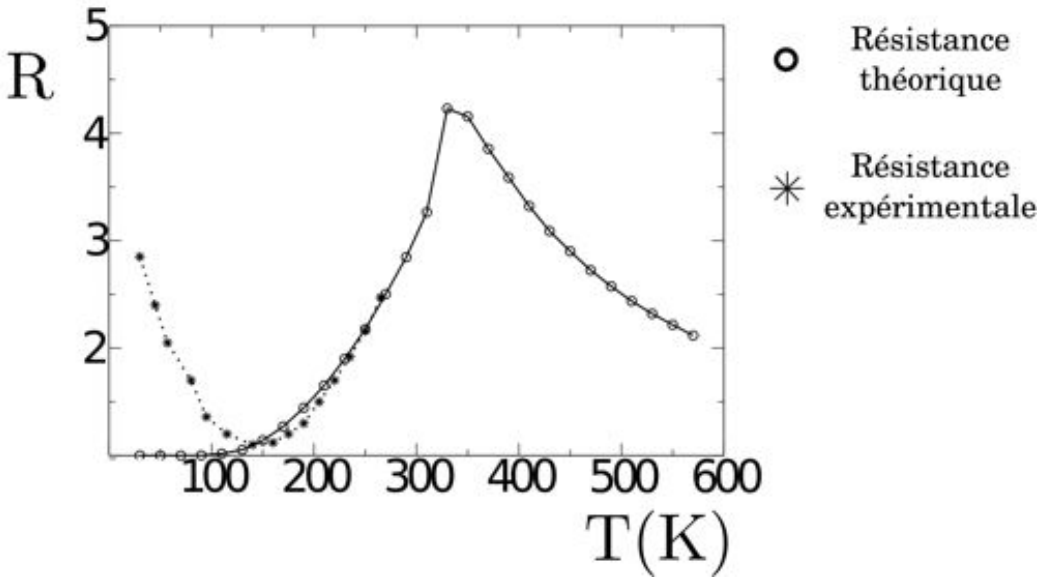

FIGURE 5.2 – *Résistivités en unitées arbitraires en fonction de la température pour le matériau $MnTe$. La courbe portant des ronds blancs correspond à la résistivité théorique dans le cas du semiconducteur non-dégénéré. La courbe portant des étoiles correspond aux résultats expérimentaux mesurés par Chandra et al. [20].*

Plusisuers remarques sont à faire à propos de ces résultats ainsi que de la méthode.

– La température de Néel observée en utilisant le calcul théorique est en bon accord avec les résultats expérimentaux, $T_N \sim 310K$ pour $J = -21.5K$.

- On note un bon accord entre les courbes théoriques et la courbe expérimentale pour une gamme de température comprise entre $T = 140K$ et $T = 280K$.

- A basse et haute température, l'utilisation de la distribution de cluster n'est plus efficace et ne permet pas de rendre compte d'un accord entre résultats théoriques et expérimentaux.

  A basse température, le réseau est magnétiquement ordonné, l'algorithme de Hoshen-Kopelmann ne détecte qu'un cluster correspondant à l'ensemble de la structure. Ainsi, nous pouvons remarquer, qu'avec ce type de traitement la résistance tend vers $R = 0$ et n'augmente pas avec l'abaissement de température comme ceci est le cas pour les résultats expérimentaux.
  A haute température, le système est complètement désordonné, le réseau est dans l'état paramagnétique. Les travaux de Chandra et al ne fournissent pas de données dans cette gamme de température.
  Cette méthode présente malgré tout un intéret autour de la température de transition T_N, gamme de température à laquelle le réseau se compose d'un enchevêtrement de clusters antiparallèles.

Nous reprenons tout de suite l'étude de ce même matériau par une simulation directe Monte Carlo (cf. chapitre 3), sans utilisation des approximations liées à l'équation de Boltzmann.

5.3 Etude des propriétés de transport de $MnTe$ par simulation Monte Carlo directe

Nous reprenons la méthode Monte Carlo que nous avons utilisée tout au long du manuscrit en utlisant directement les données expérimentales de $MnTe$. Nos simulations sont ici réalisées sur une structure hexagonale de type $NiAs$ de taille $N_x \times N_y \times N_z = 30 \times 30 \times 30a$, dans laquelle seuls les sites occupés par des ions de manganèse contribuent au magnétisme de la structure. La longueur des spins de manganèse est $|\vec{S}_{Mn}| = 5/2$, et celle des spins itinérants $|\vec{\sigma}| = 1/2$. Les spins du réseau sont modélisés par le modèle de Heisenberg. Comme pour les simulations précédentes, les spins itinérants sont polarisés et dans le cas $MnTe$ n'interagissent pas entre eux, $K_0 = 0$. Le champ électrique est fixé à $|\vec{E}| = 10^6$ V/m le long de l'axe x, soit le potentiel appliqué $U = 2.10^{-4}$ V divisé par la longueur de saut moyen des spin itinérant lors d'un déplacement dans le réseau $\sim 2\mathring{A}$. Le jeu d'interactions est le même que celui décrit au chapitre 3. Enfin, dans le but de comparer nos résultats à ceux des articles expérimentaux, nous avons ajouté des conditions périodiques dans les trois directions de l'espace. Les paramètres de simulations sont récapitulés dans le tableau 5.2.

5.3.1 Moyenne des observables du réseau

Comme pour les précédentes simulations, nous commençons par thermaliser le réseau, et effectuons une série de moyennes des observables du réseau. Le temps de thermalisation

TABLE 5.2 – Liste des paramètres de simulations pour $MnTe$

Réseau	
Distance premiers voisins	$a_1 = 3.355\mathring{A}$
Distance seconds voisins	$a_2 = 4.158\mathring{A}$
Distance troisièmes voisins	$a_3 = 5.3427\mathring{A}$
Interactions sur réseau	
Constante de couplage premiers voisins	$J_1 = -21.5K$
Constante de couplage seconds voisins	$J_2 = 2.55K$
Constante de couplage troisièmes voisins	$J_3 = -9K$
Constante d'anisotropie uniaxiale	$D_{zz} = 0.12K$
Interactions de transport	
Constante d'interaction électron-réseau	$I_0 = 2K$
Constante d'interaction électron-électron	$K_0 = 0K$
rayon de la sphère d'interaction électron-réseau	$D_1 = a_2$
rayon de la sphère d'interaction électron-électron	$D_2 = 0$
Champ électrique	$\|\vec{E}\| = 10^6 V/m$
Densité de spins itinérants	$N_0 = 10^{18} cm^{-3}$

a été fixé à 10^6 pas monte carlo sur réseau, et le nombre de moyennes à 3.10^5.
Notre problématique dans cette partie de l'étude a consistée à rendre compte de la capacité de notre modèle à reproduire des résultats expérimentaux. Notre démarche s'est appuyée dans un premier temps à prendre directement les constantes d'intéractions calculées par Hennion et al. [48] à partir de leurs résultats expérimentaux, tableau : 5.1, et de les injecter dans notre modèle de calcul. Si les articles expérimentaux ne semblent pas tous en accord sur les différentes grandeurs caractérisant le semiconducteur $MnTe$ (largeur du gap, densité de porteurs, paramètres de maille), tous donnent une même température de transition, $T_N \sim 310K$. Notre démarche s'est donc concentrée sur cette valeur dans le but de vérifier les différentes constantes de couplages. Hélas, les interactions d'échanges du tableau : 5.1 ont tendance à sous estimer la température de Néel de plusieurs dizaines de Kelvins. Nous avons donc choisi de conserver la valeur donné par Hennion de l'interaction premier voisin J_1, et d'augmenter les constantes de couplages des seconds et troisièmes voisins. Notre jeu d'interactions est donné tableau : 5.2, et nous permet l'optention d'une température de Néel de $T_N = 312K$.
Nous calculons ensuite les différentes observables du réseau (sans électrons itinérants), nous constatons un bon accord numérique entre la moyenne des spins des ions Mn en fonction de la température entre nos simulations et les mesures effectuées par Efrem et al. [30], figure : 5.3.

5.3.2 Calcul de la résistivité de $MnTe$ par simulation Monte Carlo

Dans un second temps, nous ajoutons les électrons itinérants dans le réseau, et effectuons la procédure de transport tel que nous l'avons décrit au chapitre 3. Nous prenons en compte le temps de relaxation du réseau en fonction de la température donnée par l'equation 3.18, et calculons la résistance du matériau grâce aux surfaces de comptage disposées le long de l'axe x de la structure. Rappelons le principe de cette mesure. Lors

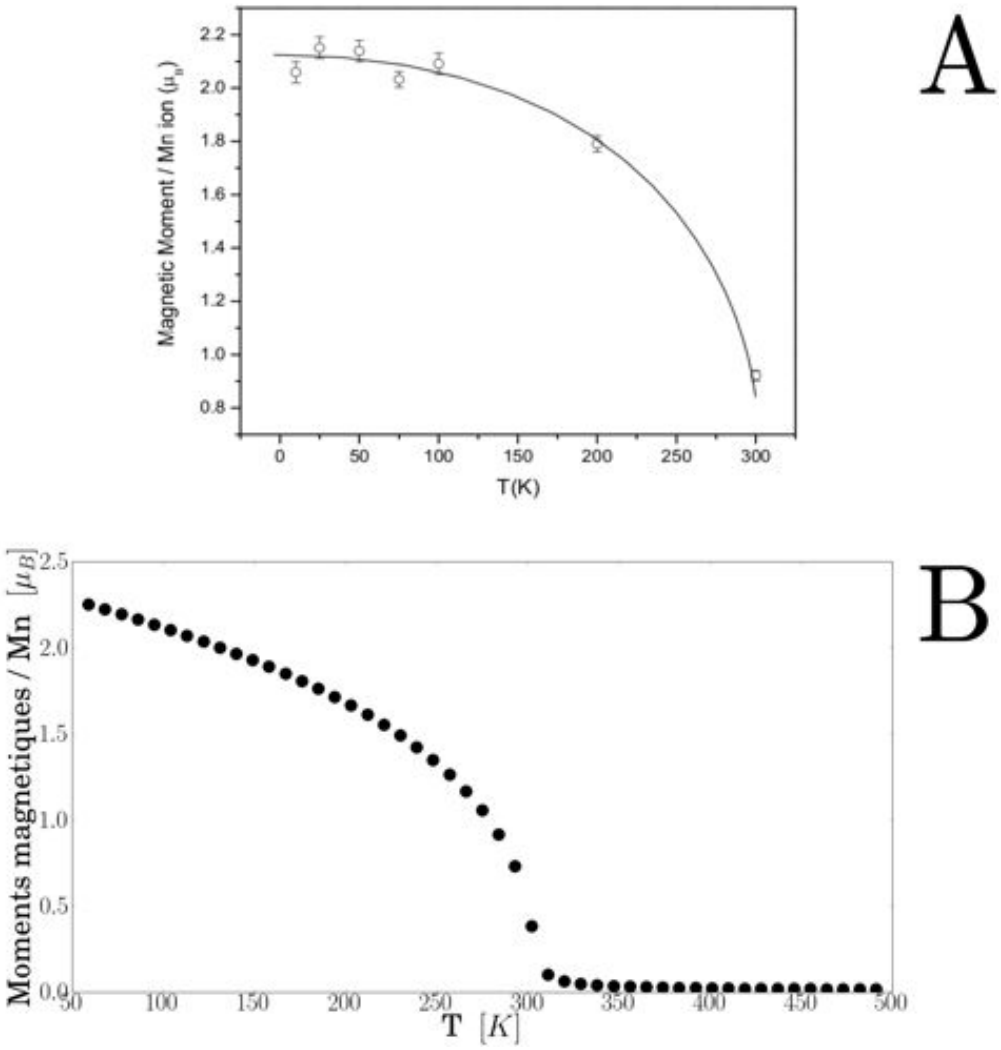

FIGURE 5.3 – A. *Variation du moment magnétique moyen des ions Mn en fonction de la température. Cette courbe est issue de l'article de Efrem et al. [30].* B. *Variation du moment magnétique moyen des ions Mn calculé par simulation Monte Carlo.*

des phases de calcul de transport nous effectuons un comptage des électrons traversant trois surfaces de comptage. Lorsqu'un électrons traverse la surface dans le sens des x positifs nous incrémentons la variable n^* de comptage des électrons, lorsqu'un électrons la traverse en sens inverse, nous décrémentons cette variable. A la fin de la simulation, nous renormalisons n^* par le nombre total des itérations de transport N_{it}, le nombre total d'électrons N_e et le nombre de surfaces de comptage N_S. n^* représente donc la probabilité $\mathcal{P}_{diff}$ de diffusion d'un électron par unité de temps Monte Carlo :

$$\mathcal{P}_{diff} = \frac{\sum_{it=1}^{N_{it}} n^*}{N_{it} N_e N_S} \tag{5.10}$$

La formulation de la résistivité faite par Drude est donnée par Eq. 5.11, avec $m_e = 9.11.10^{-31}$Kg la masse de l'électron, n le nombre d'électrons itinérants,
$e = 1.60217653.10^{-19}$C la charge d'un électron et τ_e le temps de relaxation moyen (temps

entre deux collisions) des électrons traversant la structure.

$$\rho = \frac{m_e}{ne^2\tau_e} \tag{5.11}$$

La discrétisation du modèle ne nous permet pas la mesure directe d'un temps physique, ni un calcul pertinent du libre parcours moyen. Nous devons utiliser une définition plus ou moins naturelle du libre parcours moyen dans la simulation : lorsqu'un électron refuse d'aller à une nouvelle position, nous considérons qu'il subit une collision. Le temps de relaxation est défini comme le nombre de pas Monte Carlo entre deux refus de changement de position. Soit N_{coll} le nombre de pas moyen entre deux collisions des spins itinérants . A une constante près C, il est donc possible de réécrire le temps de relaxation τ_e tel que :

$$\tau_e = C.\mathcal{P}_{diff}.N_{coll} \tag{5.12}$$

Il ne reste plus qu'à déterminer la valeur numérique de C, représentant l'ordre de grandeur caractéristique du temps de relaxation. Nous pouvons grâce aux mesures expérimentales déterminer cette constante par comparaison des courbes des résistivités. Nous avons ainsi choisi la courbe de résistivité mesurée par He et al. [47], et y avons par comparaison déterminé la valeur de C. Nous obtenons ainsi $\tau_e \sim 0.1ps$, temps caractéristique entre deux collisions dans les semiconducteurs [33]. Cette connaissance de τ_e nous permet enfin de remonter à l'expression de la résistivité énoncée par Drude dans l'équation 5.11, et enfin d'intégrer les dimensions aux différentes grandeurs retournées par le modèle. Nous notons un bon accord entre résultats de simulations et résultats expérimentaux. Ceci est présenté en figure 5.4.
Enfin, notons que même si les différents articles expérimentaux [47][62][112] présentent des courbes de résistivité de $MnTe$ différentes d'un article à un autre, l'ordre de grandeur est commun à tous, de l'ordre du Ohm centimètre.

Sur cette courbe de résistivité, nous retrouvons les comportement génériques que nous avons décrit précédemment. A savoir qu'à basse température, l'ordre du réseau fait apparaître un potentiel périodique dans lequel les électrons vont être piégés donnant lieu à une forte augmentation de la résistivité dans le sens des températures décroissantes.
Autour de la température de transition T_N, le réseau forme des clusters de spins antiferromagnétiques séparés par des zones de spins parallèles (parois de Bloch) donnant lieu à la localisation des spins itinérants dans ces zones de jonctions ferromagnétiques des différents clusters. Nous présentons dans la figure 5.5 une visualisation de cet effet de localisation à la température de Néel. En rouge nous pouvons voir les spins de Heisenberg du réseau et en bleu les spins des électrons itinérants localisés dans une zone du réseau.
Au-delà de T_N et à haute température, la résistance sature, le réseau est dans un état paramagnétique.

5.4 Calcul des grandeurs caractéristiques et justification des hypothèses du modèle de transport

POUR finir, nous soulignons que l'ajout des unités au modèle de transport va nous permettre de vérifier les hypothèses sur lesquels repose notre modèle numérique. Nous

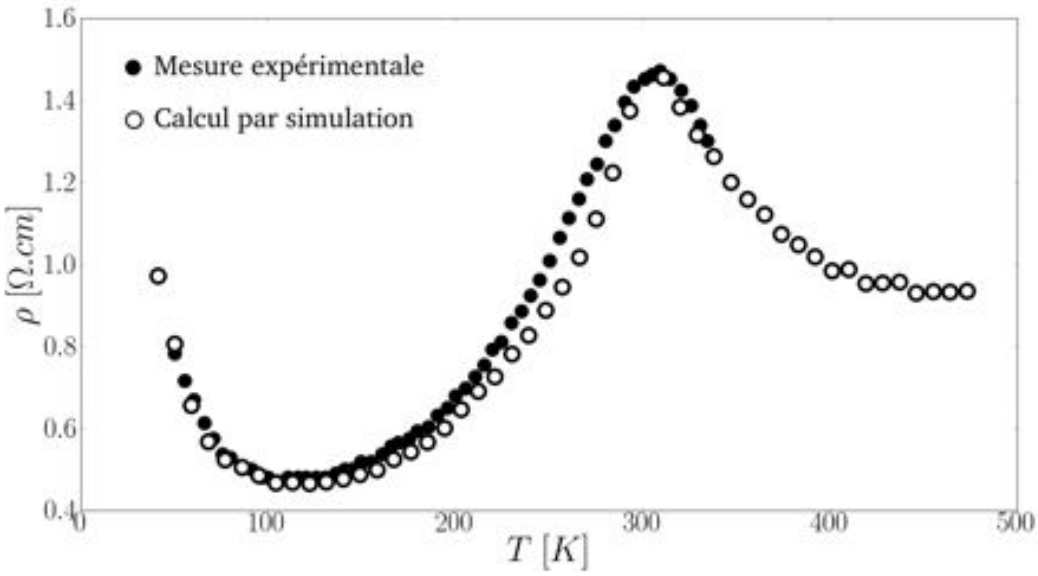

FIGURE 5.4 – *Résistivité en fonction de la température pour une structure $MnTe$ pure. Les points noirs correspondnt aux résultats expérimentaux de He et al. [47], et les points blancs à nos résultats de simulation Monte Carlo.*

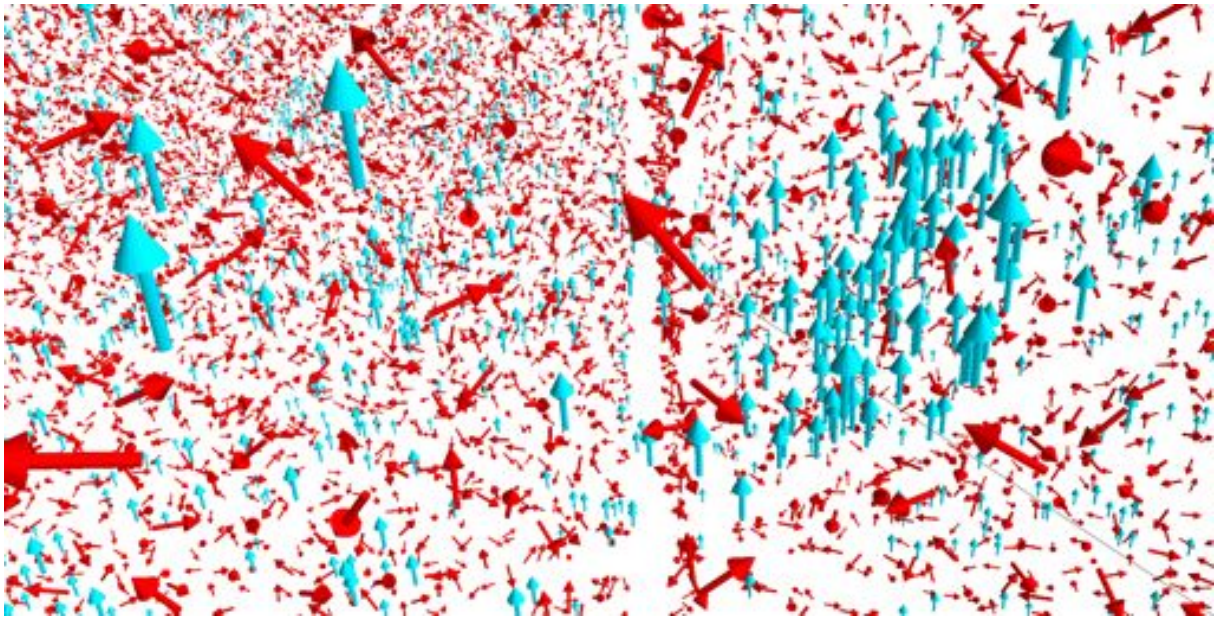

FIGURE 5.5 – *Visualisation 3D des spins du réseau en rouge, et des spins itinérants en bleu à la température de Néel T_N. On constate comme pour le cas des interactions d'Ising une localisation des spins itinérants sur le réseau de spins de Heisenberg.*

avons discuté au chapitre 1 deux points à vérifier afin de s'assurer de la validité de la méthode. La première concerne la comparaison entre libre parcours moyen l, et largeur du paquet d'onde $\lambda \sim a$. La justification de l'approche classique est alors donnée si $l > \lambda$. A partir des expressions 1.1 et 1.4 nous allons contourner les difficultés liées à

la limite classique du modèle Monte Carlo et calculer le libre parcours moyen par le biais de la théorie de Drude. Cette valeur numérique est en bon accord avec la grandeur caractéristique de ce paramètre dans les semiconducteurs qui est de l'ordre du nanomètre.

$$l = \frac{e\tau^2 E}{m_e} \sim 20\mathring{A} > \lambda \tag{5.13}$$

La seconde condition intervient par le biais de l'intensité du champ électrique appliqué. Nous avons vu qu'il est nécessaire que la condition suivante soit remplie :

$$eEa \ll \frac{\epsilon_{gap}^2}{\epsilon_f} \tag{5.14}$$

avec ϵ_{gap} la valeur du gap du semiconducteur (1.27eV pour $MnTe$), et ϵ_f l'énergie de Fermi $\sim 1eV$. e représente la charge de l'électron, E le champ électrique appliqué, et a la constante du réseau. Cette condition est bien remplie, l'application numérique donne :

$$\epsilon_{gap} \sim 1.27eV \gg 2.37.10^{-2}eV \tag{5.15}$$

5.5 Conclusion

Nous avons dans ce bref chapitre présenté une comparaison de mesures expérimentales réalisées sur un semiconducteur antiferromagnétique composé de manganèse et tellurium $MnTe$, avec nos résultats de simulations Monte Carlo. Pour réaliser ce travail, nous avons utilisé dans notre modèle numérique, les paramètres expérimentaux tels que paramètres de maille, constantes de couplage, densité de porteurs, etc...
Cette étude nous a permis de rendre compte de la capacité du modèle à fournir une comparaison quantitative des grandeurs physiques liées au réseau, telles que l'aimantation du système, mais également des grandeurs de transport telles que la résistivité. Comme pour l'ensemble des articles expérimentaux, nous rendons compte d'une résistivité de l'ordre de $\sim 1\Omega.cm$, et d'un bon accord de forme entre la résistivité mesurée par He et al. [47] avec notre résistivité obtenue par la simulation Monte Carlo. Ce travail nous a permis de justifier les hypothèses théoriques de notre modèle ainsi que l'algorithme Monte Carlo. Une fois justifiée, notre méthode permet d'étudier les effets génériques des systèmes généraux en fonction des interactions choisies dans un système d'unités atomiques et arbitraires ($e = 1$, $m_e = 1$, $J = 1$, $k_B = 1$, etc.). Cependant, pour un système réel donné, nous pouvons retrouver les unités réelles comme dans le cas de $MnTe$ présenté ci-dessus.

Chapitre

6 Transport et frustration

6.1 Introduction

L'étude des phénomènes d'ordre et de désordre représente l'une des questions fondamentales à laquelle tente de répondre la physique statistique. De nombreux travaux ont été réalisés afin de déterminer les mécanismes responsables de l'apparition d'un ordre spontané sur réseau, ainsi que la nature des transitions des états ordonnés vers des états désordonnés. Il existe cependant une famille de matériaux pour lesquels le terme d'ordre spontané devient tout à fait ambigu. Depuis une trentaine d'années, des travaux traitent de ces matériaux, il s'agit des systèmes frustrés [34][113][118][52][124]. Le terme de frustration a été introduit pour décrire une situation dans laquelle un spin ne peut trouver une orientation capable de satisfaire pleinement à l'ensemble des interactions avec les spins du réseau qui l'entourent. La frustration se retrouve pour tout type de modèle : Ising, Heisenberg, XY, Potts. L'origine de la frustration provient d'une compétition entre interactions. On peut citer par exemple le modèle de Villain [115] ou le réseau triangulaire avec interaction antiferromagnétique. Les réseaux antiferromagnétiques cubiques à faces centrées (FCC), ou hexagonaux (HCP), dont les interactions antiferromagnétiques sont prises aux premiers voisins, font partie des réseaux les plus frustrés. Malgré le fait que ces systèmes ont fait l'objet d'un nombre impressionnant d'études, beaucoup de choses sont encore mal comprises. Des revues sur les différents aspects ont été récemment données dans Ref. [27].

Prenons l'exemple des spins S_i et S_j en interaction avec une constante de couplage J. L'énergie est donnée par :

$$E = -J \sum_{i \neq j} S_i . S_j \tag{6.1}$$

Si J est positif, les interactions entre spins sont ferromagnétiques. L'énergie minimum de E correspond pour le cas ferromagnétique à une orientation parallèle des spins entre chaque site voisin. Dans ce cas le système est dans son état fondamental, l'ensemble des interactions sont pleinement satisfaites.
Si J est négatif, les interactions sont antiferromagnétiques. Dans ce cas, les orientations entre spins du réseau sont antiparallèles. Pour des structures ne comportant pas de motifs triangulaires, ce qui est le cas des cubiques simples (SC) interactions premiers voisins, ou cubiques centrés (BCC), les interactions sont pleinement satisfaites et le réseau est dans son état fondamental antiferromagnétique.
Pour un réseau triangulaire montré dans la figure 6.1, toutes les interactions ne peuvent être satisfaites silmultanément, le système est frustré. La frustration peut avoir plusieurs origines : la première correspond à celle des réseaux triangulaires que nous venons de décrire. Une seconde situation peut être décrite par la compétition de deux interactions.

Par exemple, imaginons une chaîne de spins sur laquelle les interactions premiers voisins sont choisies ferromagnétiques : $J_1 > 0$, alors que les interactions seconds voisins sont choisies antiferromagnétiques $J_2 < 0$. Si $|J_2| \ll J_1$, l'état fondamental est ferromagnétique dans lequel les interactions premiers voisins sont satisfaites, mais pas les interactions seconds voisins, d'où l'apparition de frustration.

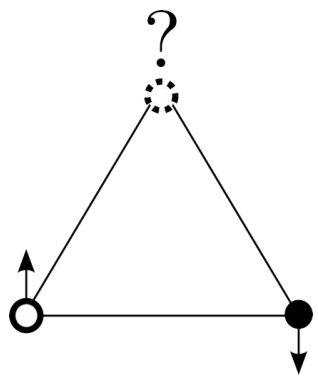

FIGURE 6.1 – *Maille d'un réseau triangulaire dont chaque site est occupé par un spin en interaction antiferromagnétique avec ses plus proches voisins.*

Dans ce chapitre nous étudions les propriétés de transport à travers un réseau frustré antiferromagnétique FCC avec le modèle d'Ising. Nous étendrons par la suite l'étude au modèle de Heisenberg. La frustration du réseau FCC antiferromagnétique provient du motif triangulaire du réseau. Ce système est connu pour présenter une transition du premier ordre dans le cas d'Ising [27][96][25][66]. Comme la résistance est extrêmement sensible à l'ordre (désordre) local du réseau, ce système représente donc un excellent candidat pour amorcer l'étude du transport dans les systèmes frustrés.

Dans un premier temps, nous présenterons et interpréterons les différentes courbes de résistivité en fonction des différents états dégénérés du système. Nous verrons que la forme des transitions des résistances sont tout à fait surprenantes d'un état dégénéré à un autre. Dans un second temps, nous nous intéresserons à l'impact du désordre induit par les surfaces (001) qui représentent une source d'instabilité du fait du manque de voisins des surfaces. Enfin, nous reprendrons l'étude dans le cas de Heisenberg qui présente également une transition du premier ordre.

6.2 Description du réseau cubique à faces centrées antiferromagnétique

COMME nous l'avons souligné, le réseau FCC antiferromagnétique est un réseau fortement frustré. Ce réseau est composé de mailles primitives tétrahédriques dont chaque face est un triangle équilatéral. Les spins occupant les nœuds de ce réseau ne peuvent satisfaire simultanément l'ensemble de leurs interactions antiferromagnétiques, conduisant le système à une infinité d'états dégénérés [27]. Dans le cas des films minces, nous allons définir plusieurs constantes de couplage : J_c qui sera appliquée pour les interactions de volume, c'est-à-dire pour toutes les sites ayant 12 voisins, J_s pour les interactions des

sites des surfaces (001) ayant 8 voisins.
Afin de ramener le nombre d'états dégénérés à une valeur finie, nous avons fixé deux constantes de couplage, dont le rapport permet de fixer l'un des deux états dégénérés [96]. Pour $|J_s| < 0.5|J_c|$ l'état fondamental se compose de plans ferromagnétiques xy empilés antiferromagnétiquement le long de l'axe z, ou de plans ferromagnétiques xz empilés antiferromagnétiquement le long de x. Dans le cas du rapport $|J_s| > 0.5|J_c|$, les plans xy sont ferromagnétiques empilés antiferromagnétiquement le long de y. La figure 6.2 montre ces états fondamentaux.

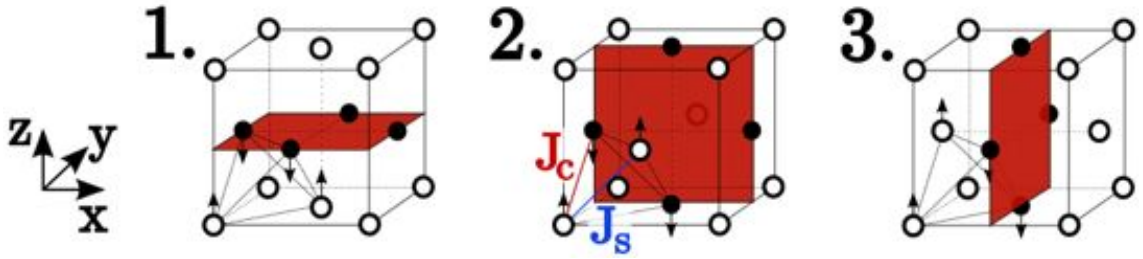

FIGURE 6.2 – *Etats fondamentaux d'une structure FCC antiferromagnétique. Les configurations (1) & (3) correpondent à des constantes de couplage fixées tel que : $|J_s| < 0.5|J_c|$. La configuration (2) à $|J_s| > 0.5|J_c|$. Les plans rouges représentent le sous réseau ferromagnétique.*

6.3 Transport de spin à travers un réseau frustré cubique à faces centrées

COMMENÇONS par commenter les différences entre les trois configurations de la figure 6.2. Dans les cas (1) & (2) les sous-réseaux ferromagnétiques sont les plans parallèles à l'axe x, par contre la configuration (3) comporte des plans ferromagnétiques perpendiculaires à x. Du point de vue du transport de spin cette différence est considérable. En effet, les spins se propagent le long du champ électrique E appliqué suivant la direction x. Dans les configurations (1) & (2), les électrons induisent un courant parallèle aux plans ferromagnétiques sans rencontrer des spins antiparallèles. Du point de vue du transport, les mécanismes de diffusion sont les mêmes dans les deux premiers cas. Dans le cas (3), la dynamique de transport sera radicalement différente car les spins itinérants vont rencontrer successivement des plans ferromagnétiques parallèles et antiparallèles, ces plans sont perpendiculaires à la direction de leur propagation (axe x). Autrement dit, si pour un jeu de conditions initiales donné, les spins itinérants minimisent leur énergie à proximité des plans ferromagnétiques parallèles, ces spins se heurtent à chaque demie maille à un plan d'énergie défavorable (antiparallèle). Ces deux configurations vont induire deux types de transitions de la résistance magnétique à T_N. Une transition de saut des basses résistances vers les hautes résistances dans le sens des températures croissantes pour les configurations (1) & (2), ou une transition de chute des hautes résistances vers les basses résistances dans la configuration (3).

Dans tout ce chapitre, nous utilisons les mêmes procédures de thermalisations et de mesures que dans les chapitres précédents. A savoir, nous commençons par thermaliser

le réseau à une température donnée. Une fois le réseau à l'équilibre, nous introduisons aléatoirement des spins itinérants accélérés par un champ électrique appliqué sur l'axe x. Des conditions périodiques sont utilisées sur les axes x et y. Sur z, on utilise les réflexions miroir.
Nous commençons par présenter le paramètre d'ordre, l'aimantation en fonction de la température, dans la figure 6.3. Comme nous l'avons déjà remarqué, cette transition est du premier ordre et prend place autour de $T_N = 1.79$. A cette température le système bascule instantanément de l'ordre au désordre. Une étude poussée de ce système a été réalisée par Pham Phu et al [96]. Les résultats de cette étude soulignent le caractère persistant de la transition premier ordre jusqu'à une épaisseur de quatre couches atomiques.

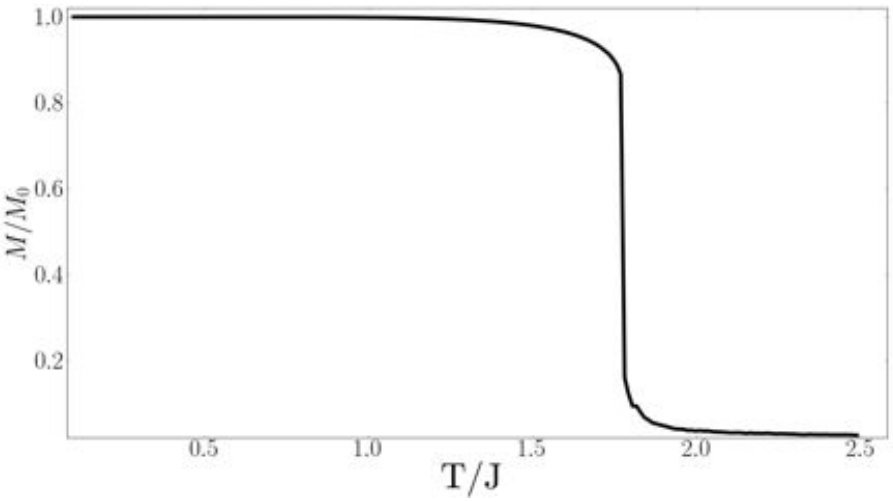

FIGURE 6.3 – *Aimantation renormalisée de la structure antiferromagnétique FCC pour une épaisseur $N_z = 8a$. La température de transition est observée à $T_N = 1.79$.*

6.3.1 Interprétation de la résistance magnétique de l'état dégénéré (1)

Considérons le premier état dégénéré de la structure FCC antiferromagnétique présentée en figure 6.2.1. Nous fixons les constantes d'échange du réseau tel que : $J_s = J_c = -1$. Comme pour le cas des antiferromagnétiques non-frustrés, l'augmentation du paramètre D_1 va avoir pour effet d'inclure plus ou moins de spins up et down du réseau dans la sphère d'interaction électron-réseau. Il résulte de la variation de D_1 une fluctuation des différentes observables de transport telles que la résistance R, l'énergie d'interaction des spins itinérants avec les spins du réseau E_{e-i}, la composante moyenne des vitesses sur x (v_x) ou encore la différence du nombre moyen des spins up et down moyennée dans la sphère d'interaction ($\Delta N_{\uparrow\downarrow}$). Ces variations sont la conséquence des configurations spatiales des structures antiferromagnétiques, ainsi que du caractère fini de D_1. L'interprétation des oscillations et le recoupement des différentes grandeurs ne changent pas par rapport au cas BCC antiferromagnétique que nous avons réalisé au chapitre précédent. Cependant, le caractère premier ordre de la transition de phase du réseau va nous permettre de travailler de part et d'autre de T_N à $T_N^{\pm} = T_N \pm \epsilon$ dans des états

antiferromagnétiques ordonnés et paramagnétiques, à proximité de la transition.

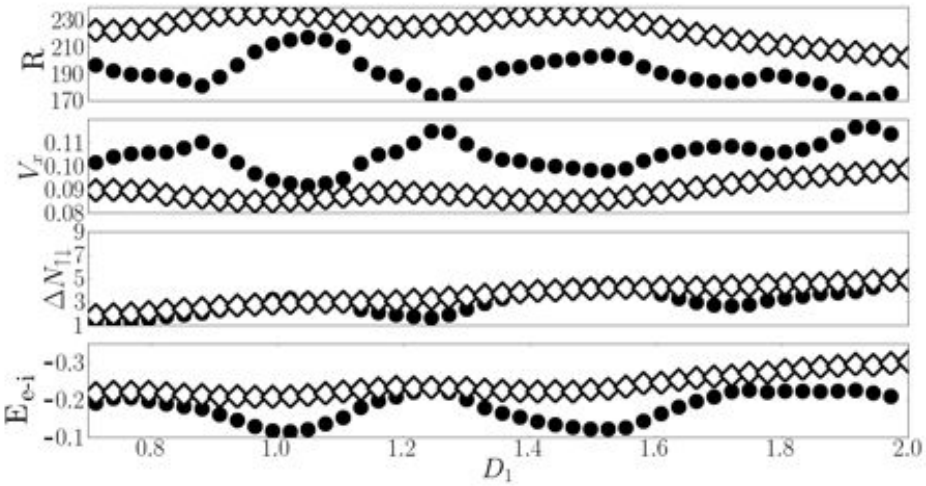

FIGURE 6.4 – *Variation de différentes grandeurs physiques en fonction de D_1 (en unité du paramètre de maille a) dans le cas dégénéré (1). Les points noirs correspondent à l'évolution des grandeurs à $T_N^- = 1.65$, les losanges blancs à $T_N^+ = 2$. De haut en bas : Résistance R, composante moyenne v_x des vitesses sur x , différence entre le nombre de spins up et down $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ moyennée dans la sphère d'interaction D_1 , énergie moyenne d'interaction E_{e-i} entre un spin itinérant et les spins voisins du réseau dans la sphère d'interaction D_1.*

- A T_N^-, lorsque $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ est maximum, le nombre moyen de spins up en interaction avec les spins itinérants est maximum. Les spins sont polarisés et en interaction ferromagnétique avec les spins du réseau. L'énergie E_{e-i} qui en résulte est minimum (maximum) lorsque $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ est maximum (minimum). Nous rappelons que la diffusion des électrons est réalisée lorsque ces derniers rencontrent des zones d'énergie défavorables. Dans ce cas, lorsque E_{e-i} est minimum, la vitesse des électrons le long du champ est minimum, et par conséquent la résistance présente un maximum.

- A T_N^+, le réseau est paramagnétique, les nombres moyens de spins up et down du réseau à l'intérieur de la sphère d'interaction doient être constants et égaux. On note néanmoins de très légères oscillations dues à la valeur finie de D_1 et à la distance pas très éloignée de T_N. En effet, notons que l'amplitude des fluctuations est réduite à mesure que D_1 augmente et T augmente. Dans la limite des $D_1 \to \infty$, les différentes grandeurs ne présentent plus d'oscillations.

Examinons maintenant les courbes de résistance en fonction de la température pour deux valeurs de D_1 correspondant à un maximum et un minimum de R, présentées en figure 6.5. Dans ces deux cas, la résistance mimum (maximum) pour les basses températures augmente (diminue) dans le sens des températures croissantes et présente une discontinuité des basses vers les hautes résistances à T_N. Après la transition, la résistance tend lentement vers une valeur de saturation, indépendament de la valeur de D_1.

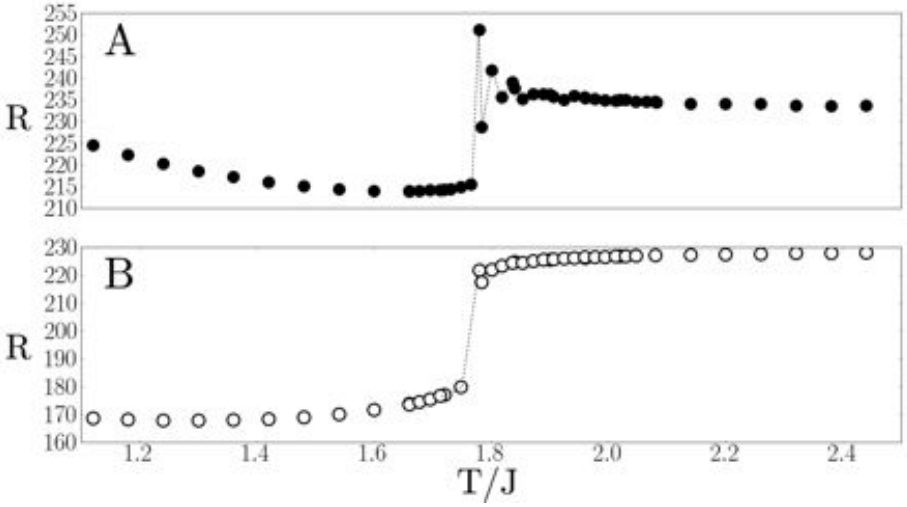

FIGURE 6.5 – *Résistance d'un film mince de taille $N_x = N_y = 20a$ et $N_z = 8a$ pour $N_0 = 1600$ électrons itinérants en fonction de la température dans l'état dégénéré (1). Les points noirs (A) ont été réalisés avec un rayon $D_1 = a$, les points blancs (B) avec un rayon $D_1 = 1.25a$. Les autres paramètres ont été fixés tel que : $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.*

Résistance à basse température

A très basse température, la résistance croît légèrement dans le sens des températures décroissantes. Les électrons occupent les positions de minimum d'énergie du potentiel périodique. Par conséquent, dans cette gamme de températures, la mobilité des électrons est réduite et la résistance augmente. Tant que l'énergie thermique et le champ électrique sont faibles devant l'énergie d'interaction des spins avec le réseau, les spins itinérants sont dans un état de pseudo-cristallisation. Nous avons étudié en détail ce phénomène pour le cas FCC ferromagnétique. Nous avons mis en évidence par le biais du calcul de la fonction de distribution radiale, une répartition spatiale périodique des électrons dans le réseau aux faibles températures. Soulignons que l'augmentation de la résistance à basse température a également été observé dans de nombreuses études expérimentales comme le montre la figure 11 de l'article de Chandra sur le semiconducteur dopé CdMnTe [20], la figure 2 de l'article de Du [31] pour le composé MnFeGe, la figure 6.a de l'article de McGuire sur les superconducteurs LaFeAsO [73], la figure 2 de l'article de Lu [65] sur les antiferromagnétiques LaCaMnO, ou encore la figure 7 de l'article de Santos sur les antiferromagnétiques LaSrMnO [100]. Dans ces articles, notons néanmoins que la concentration de porteurs varient avec la température, ce dont ne tient pas compte notre modèle. Ce point sera l'un des objectifs futurs qu'il serait intéressant d'implémenter, car il nous permettrait une comparaison systématique de nos résultats avec les résultats expérimentaux, tel que nous l'avons réalisé avec MnTe dans le chapitre précédent. En revanche, une étude qualitative reste possible. En effet, nous avons étudié précédement l'effet de la densité des porteurs sur les courbes de résistances. Nous avons mis en évidence que les différents comportements de ces courbes en fonction de la température ne sont pas affectés outre mesure par la densité des porteurs. Nous faisons donc l'hypothèse suivante : même si une comparaison rigoureuse des résultats de simulations avec des résultats expérimentaux reste à

réaliser, le comportement global qualitatif des résistances en fonction de la température ne changera pas, et l'analyse des comportements génériques reste possible. Pour conclure sur le comportement de résistance à très basses tempértaure, soulignons un travail réalisé par Zhang et al. [127] traitant de la question de l'augmentation de R à basse T qui conclut sur un ordre de charges dans un alliage $Pr_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$. Les auteurs attribuent ce comportement aux interactions des spins avec le réseau. Même si notre modèle ne correspond pas à ce matériau, notons que l'idée de base de cristallisation des électrons itinérants reste le même.

Résistance à la température de transition T_N

A la température de transition T_N, la résistance présente une discontinuité, R saute des basses résistances vers les hautes résistances. Contrairement au cas non-frustré étudié précédemment, la structure FCC antiferromagnétique présente une transition d'ordre un. Pour les systèmes non-frustrés, nous avons vu que le passage d'un état magnétique ordonné à un état désordonné passait par une zone de ralentissement critique dans laquelle le système présentait un enchevêtrement de clusters up et down pour les systèmes ferromagnétiques et de clusters antiferromagnétiques séparés par des parois ferromagnétiques pour les systèmes antiferromagnétiques. Dans le cas des systèmes de transition du premier ordre, le magnétisme de la structure n'évolue quasiment pas des basses températures jusqu'à la température de transition. Cependant, à la température de transition, le système passe quasi instantanément de son état ordonné à un système paramagnétique. A proximité de la température de transition T_N, le système présente une distribution de zones d'ordre, chacune dans un état dégénéré du système. La description de la dynamique des spins est radicalement différente avec le cas non-frustré : dans le cas des systèmes frustrés, on ne parle plus ni de localisation, ni de pic à la transition, mais d'une modification brutale de la mobilité des spins itinérants fonction des différents états dégénérés que traversent les porteurs. Cette répartition aléatoire des domaines de type (1), (2) et (3) présentés en figure 6.3), provoque un transport plus ou moins aisé des spins à travers le réseau d'où l'origine de l'oscillation légère de la résistance tout de suite après T_N.

Nous avons d'ailleurs étendu cette étude à un réseau cubique simple (SC) antiferromagnétique connu pour être fortement frustré avec des spins d'Ising. Il s'agit du modèle $J_1 - J_2$ [49]. La frustration de ce système provient de la prise en compte des interactions entre spins du réseau aux premiers voisins J_1, et second voisins J_2, figure 6.6.

Nous présentons sur la figure 6.7 les courbes des résistances magnétiques calculées à l'aide de notre méthode Monte Carlo pour $J_1 = -1$ et $J_2 = -0.26J_1$, paramètres correspondant au maximum de frustration. Comme pour le cas FCC antiferromagnétique, le rayon de la sphère d'interaction D_1 détermine le sens de la transition de phase. Cette étude, vient confirmer un comportement similaire, d'une part, le caractère premier ordre de la transition de phase magnétique induit une discontinuité de la résistance, et d'autre part, une forte dépendance de la résistivité de la porté des interactions avec les spins du réseau.

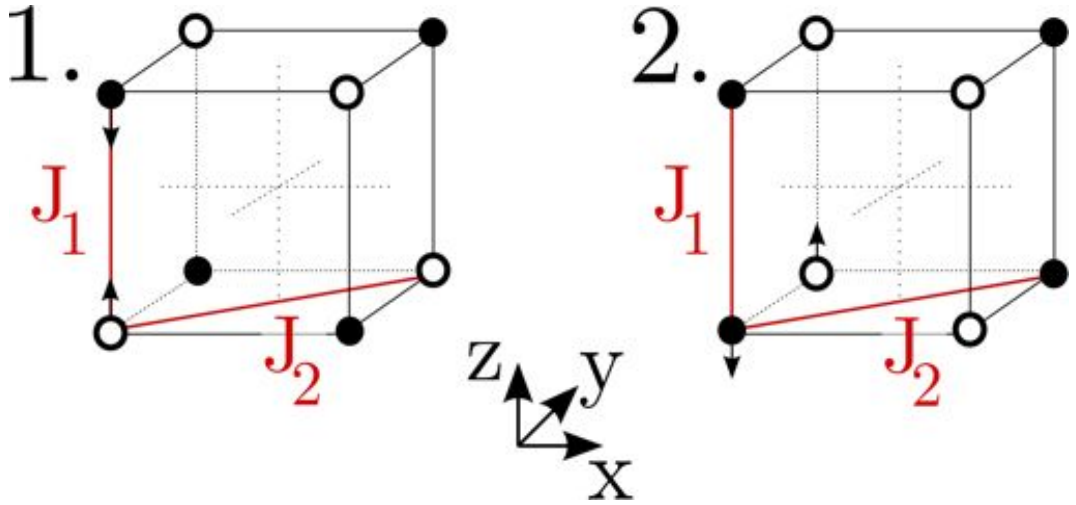

FIGURE 6.6 – *Représentation d'un réseau cubique simple. Les spins up correspondent aux sites blancs, les spins down aux cercles noirs. Les constantes de couplages J_1 et J_2 correspondent respectivement aux interactions premiers et seconds voisins. L'état dégénéré (1) correspond à $|J_2| < 0.25|J_1|$. L'état dégénéré (2) correspond à $|J_2| > 0.25|J_1|$.*

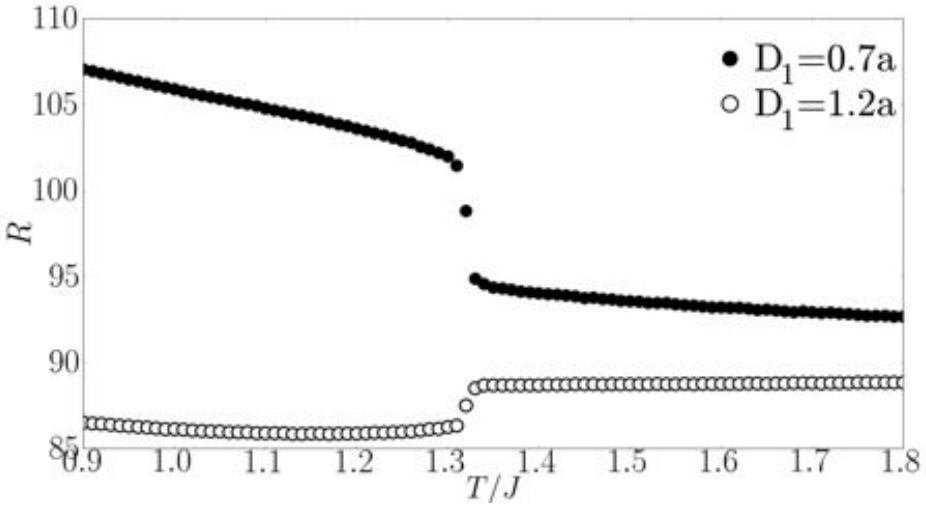

FIGURE 6.7 – *Résistances magnétiques mesurées par simulation Monte Carlo pour $D_1 = 0.7a$ (points noirs), et $D_1 = 1.2a$ (points blancs) [49].*

Résistance à haute température

Au delà de la température de transition, le réseau adopte un état paramagnétique. Les spins fluctuent fortement donnant lieu à la diffusion. La résistance décroît et sature dans la limite des $T \to \infty$. Aucune différence n'est à souligner par rapport aux cas précédement étudié pour ces températures.

6.3.2 Interprétation de la résistance magnétique de l'état dégénéré (3)

Reprenons l'étude de la résistance magnétique dans le second état dégénéré présenté en figure 6.2.3. Dans cette configuration, les plans yz sont ferromagnétiques et empilés anti-ferromagnétiquement le long de x. Nous traçons en figure 6.8, comme pour le cas dégenéré (1), l'évolution des différentes grandeurs physiques (la résistance R, la vitesse moyenne v_x des spins le long de x, l'énergie d'interaction moyenne des spins avec le réseau E_{e-i}, et la différence $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$) du nombre de spins up et down en interaction dans la sphère de rayon D_1, pour deux températures prises de part et d'autre de T_N. Nous observons ici que les courbes mesurées à une température inférieure à T_N, T_N^-, croisent pour certains domaines de D_1 les courbes mesurées au-delà de T_N à T_N^+. Si $R(T_N^-, D_1) < R(T_N^+, D_1)$ la transition présentera une discontinuité allant des basses résistances vers les hautes résistances dans le sens des températures croissantes. Dans le cas contraire, $R(T_N^-, D_1) > R(T_N^+, D_1)$, la transition se fera dans l'autre sens. La résistivité présentera une discontinuité allant des hautes résistances vers les basses résistances dans le sens des températures croissantes, comme cela est présenté sur la figure 6.9.

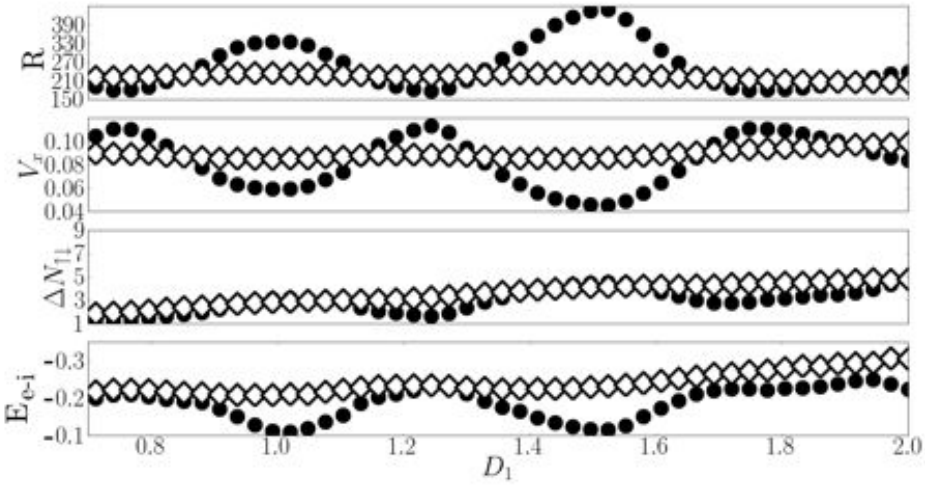

FIGURE 6.8 – *Variation de différentes grandeurs physiques en fonction de D_1 dans le cas dégénéré (3). Les points noirs correspondent à l'évolution des grandeurs à $T_N^- = 1.65$, les losanges blancs à $T_N^+ = 2$. De haut en bas : Résistance R, composante moyenne v_x des vitesses le long de l'axe x, différence $\Delta N_{\uparrow\downarrow}$ entre le nombre de spins up et down moyennée dans la sphère d'interaction D_1, énergie moyenne d'interaction E_{e-i} entre un spins itinérant et les spins voisins du réseau dans la sphère d'interaction.*

Nous pouvons ainsi approximativement identifier les domaines de D_1 pour lesquels les transitions présenteront un saut ou une chute de résistance à T_N.
La superposition des courbes de résistance dans les deux cas dégénérés (1) et (3) valide nos premières hypothèses (cf. figure 6.12).

A basse température, l'orientation des plans ferromagnétiques par rapport à l'axe x, joue un rôle déterminant sur la mobilité des spins itinérants. Dans le cas où les plans fer-

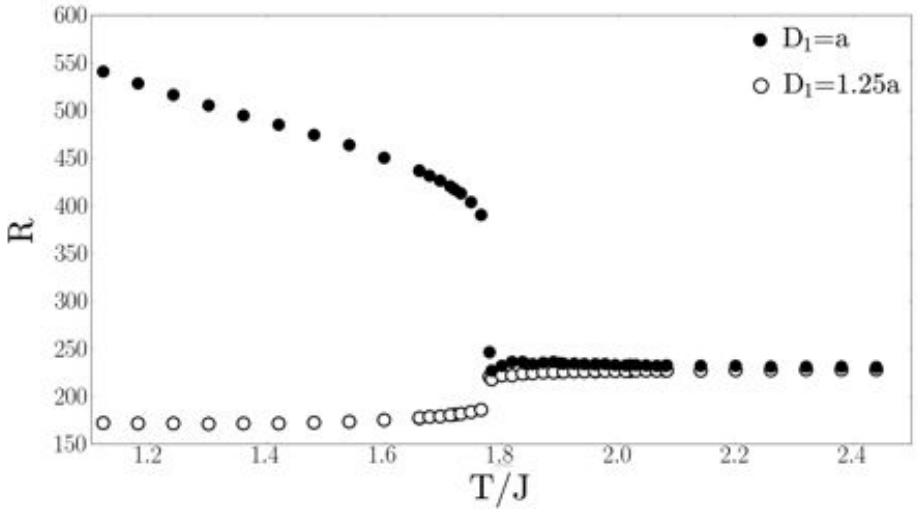

FIGURE 6.9 – *Résistance d'un film mince de taille $N_x = N_y = 20a$ et $N_z = 8a$ pour $N_0 = 1600$ électrons itinérants en fonction de la température dans l'état dégénéré (3). La courbe noire a été réalisée avec un rayon $D_1 = a$, la courbe blanche avec un rayon $D_1 = 1.25a$. Les autres paramètres ont été fixés tel que : $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.*

romagnétiques sont parallèles à x, les électrons suivent des plans ferromagnétiques sans rencontrer d'obstacles, la résistance est basse et la transition présente un saut. Dans le cas (3), l'électron se heurte chaque demie maille à des plans de spins opposés perpendiculaires à sa trajectoire, la résistance est élevée et la transition présente une chute. Les isosurfaces des énergies permettent de d'intuiter les différents trajects empruntés par les électrons selon l'état dégénéré. Ainsi, nous constatons que notre hypothèse initiale est en bon accord avec ces visualisations. Dans le cas dégénéré (1), les plans de basses énergies sont parallèles à x, alors que le cas (3) présente une alternance de minimums et de maximums le long de l'axe x. Ceci est présenté en figure 6.10. Le mouvement des spins est pondéré par les énergies d'interaction avec le réseau entre deux positions selon l'algorithme de Métropolis [87]. Plus la différence d'énergie entre deux positions successives est grande, et moins l'électron a de chance de bouger, la résistance est forte. Ce qui est le cas pour l'état (3) dans lequel l'électron se lie à un plan de basse énergie sans pouvoir vaincre la différence d'énergie du plan de haute énergie voisin. Si cependant la différence d'énergie est constante, le champ électrique tend a faire bouger l'électron et la résistance est faible, comme dans le cas de la configuration (1) où les plans de basses énergies s'étalent le long de x. On observe enfin sur la figure 6.11 la dynamique temporelle d'un électron dans les deux configurations. Dans le cas (1), l'électron traverse la structure pour 250 pas Monte Carlo de transport, alors que dans le cas (3), l'électron est bloqué pour le même temps de transport.

A la transition on note que les deux résistances se croisent. A cette température, le système présente un mélange de l'ensemble des états dégénérés.

Dans la phase paramagnétique, à haute température les courbes se superposent, les deux structures sont désordonnées et indépendantes de leurs états initiales.

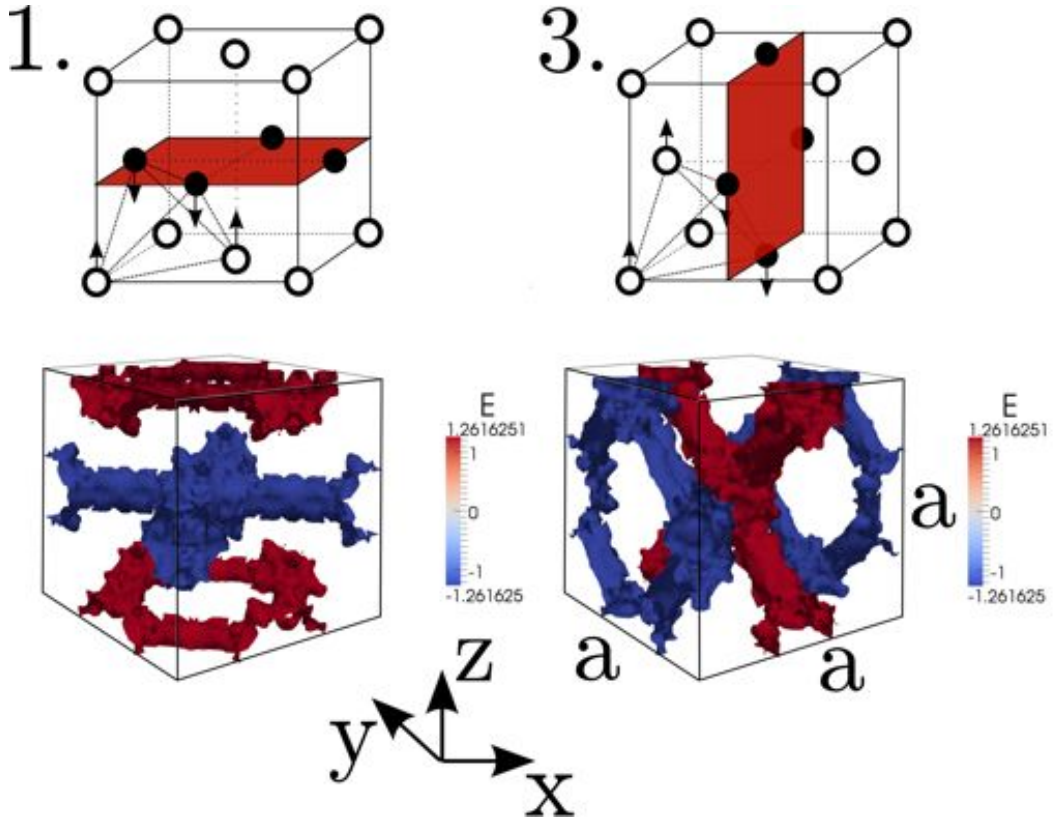

FIGURE 6.10 – *Isosurfaces des maximums (surfaces rouges) et des minimums (surfaces bleues) d'énergies dans une maille* $a \times a \times a$ *à* $T = 1$ *pour les cas (1) et (3) (respectivement gauche et droite).*

6.4 Effets de surfaces

AFIN d'étudier l'influence des surfaces (001) sur la stabilité du réseau, nous réduisons l'interaction d'échange de surface $J_s = -0.5$ par rapport aux interactions de volume $J_c = -1$ entre spins premiers voisins du réseau. Les courbes d'aimantation des plans de surfaces (001) présentent une transition à basse température $T_1 = 1.2$, conséquence de la réduction de la rigidité des spins, et du manque de voisins de ces plans. Le volume présente lui, une transition à $T_2 = 1.79$ (cf. figure 6.13). Une conséquence directe de ces deux transitions est observée sur la courbe de résistance présntée à la figure 6.14. Nous constatons sur cette dernière courbe deux transitions de résistance. La première correspond à la température T_1, transition magnétique des plans de surfaces (001), la seconde à la transition de volume T_2.

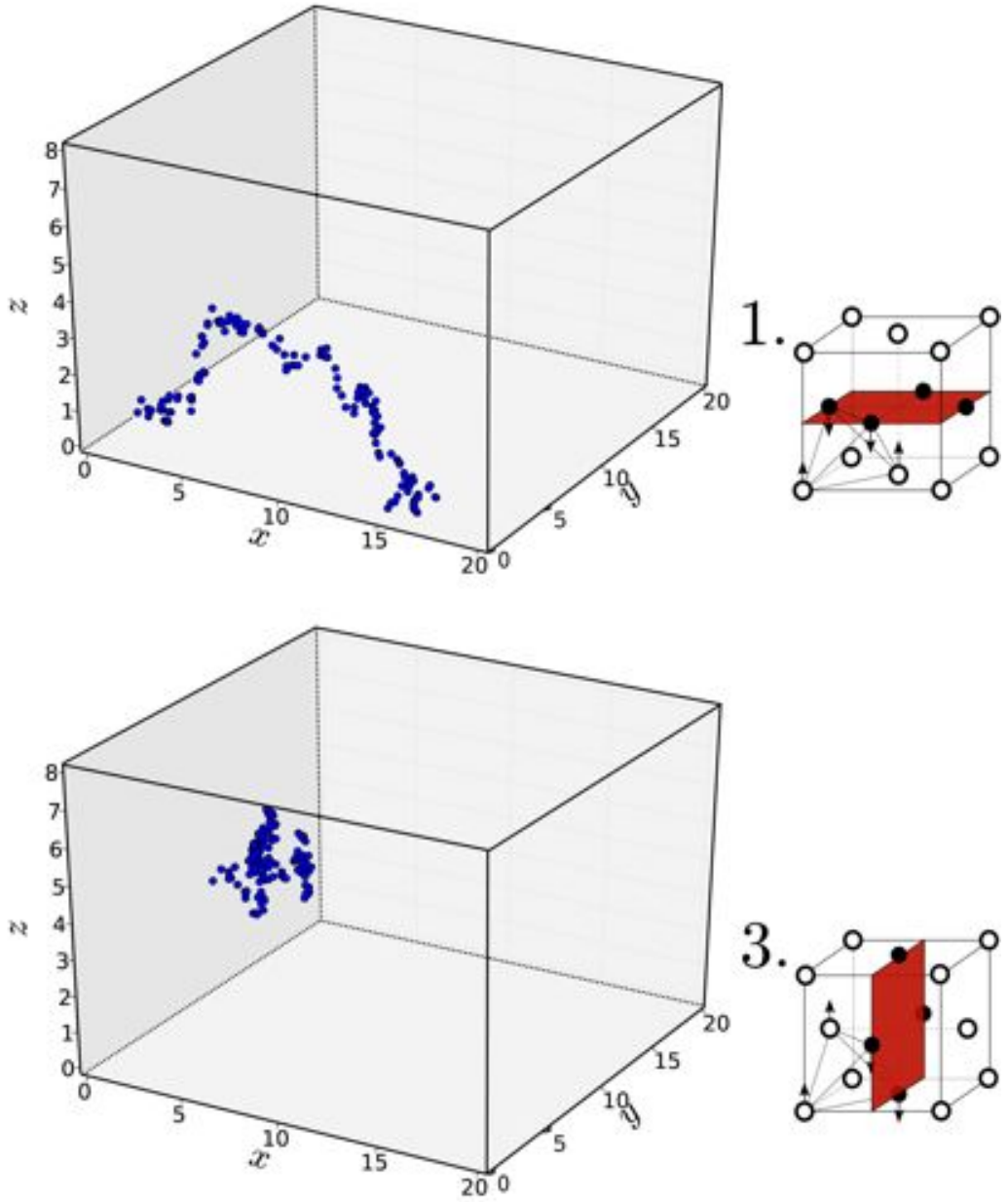

FIGURE 6.11 – *Trajectoire d'un spin itinérant à $T = 1.65$ dans le premier état dégénéré du réseau (en haut), et dans le second état dégénéré (en bas). Les simulations pour les deux états ont été réalisées pour le même temps de transport et la même valeur de D_1. Les autres paramètres sont les suivants : $N_0 = 1600$, $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.*

6.5 Résistance avec modèle de Heisenberg sur le réseau frustré FCC antiferromagnétique

NOUS réalisons la même étude dans le cas du modèle de Heisenberg. Comme précédemment, nous utilisons des spins polarisés pour déterminer les courbes de résistance à travers un matériau antiferromagnétique FCC frustré. Nous souhaitons avec le modèle de

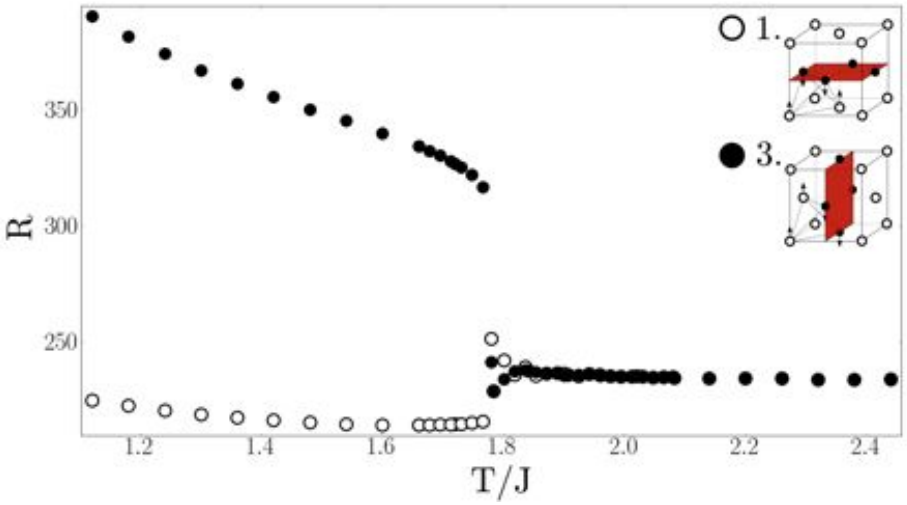

FIGURE 6.12 – *Résistance en fonction de la température dans le premier état dégénéré (ronds blancs) et dans le second état dégénéré (ronds noirs). Les paramètres sont les suivants :* $D_1 = a$, $N_z = 8$, $N_0 = 1600$, $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$.

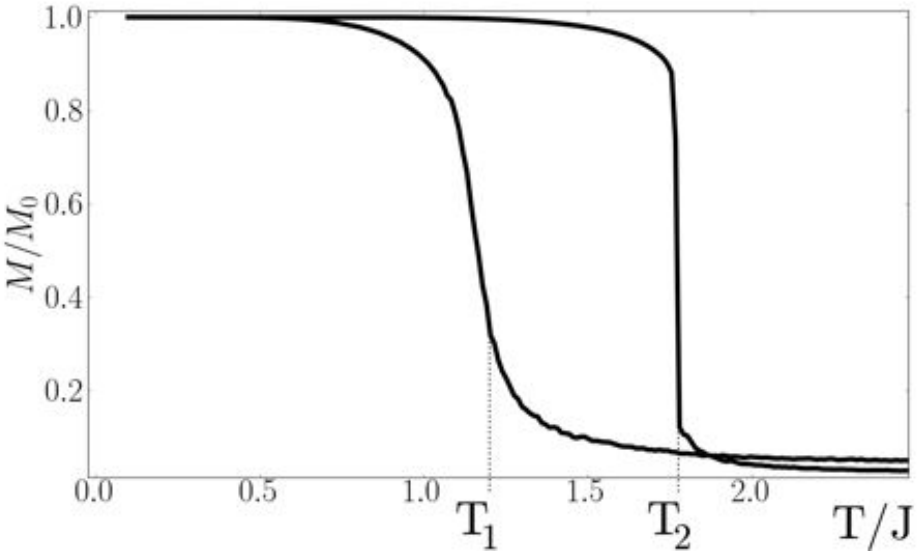

FIGURE 6.13 – *Courbes d'aimantation des plans de surfaces (001), et de volume en fonction de la température. Les paramètres de simulation sont les suivants :* $D_1 = a$, $N_z = 8a$, $J_s = -0.5$,$J_c = -1$. *La transition magnétique des plans de surfaces prennent place à* $T_1 = 1.2$, *la transition de volume à* $T_2 = 1.79$.

Heisenberg souligner les effets liés à la nature continue du spin sur les différentes grandeurs de transport. Dans ce travail, seul le Hamiltonien des spins du réseau est modifié (cf. Eq. 6.5). Le reste des procédures de mises à l'équilibre et de mesures reste inchangé par rapport aux travaux précédents.

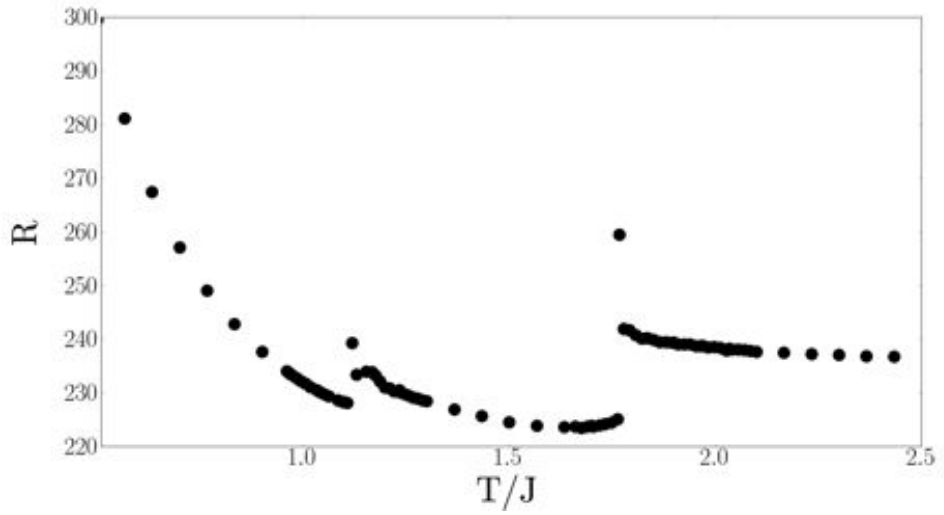

FIGURE 6.14 – *Résistance en fonction de la température pour :* $D_1 = a$, $N_z = 8$, $N_0 = 1600$, $J_s = -0.5$, $J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$, $D = 0.35$. *Nous remarquons deux anomalies liées aux deux transitions du réseau : transition des surfaces à* $T_1 = 1.2$ *et transition de voulme à* $T_2 = 1.79$.

$$\mathcal{H} = \sum_{i \neq j} J_{i,j} \vec{S}_i . \vec{S}_j - D_{zz} \sum_{i \neq j} S_i^z S_j^z \tag{6.2}$$

Avec $\vec{S}_i$ un spin de Heisenberg localisé sur le site i du réseau FCC, et D_{zz} une petite constante d'anisotropie de type Ising, fixée négativement et ayant pour but de favoriser un ordre antiparallèle entre spins premier voisin le long de l'axe z. Il nous faut introduire cette nouvelle variable pour le traitement des spins de Heisenberg pour les structures en couches minces. Car dans la limite des $D \to 0$, le réseau est quasi bidimensionnel et ne présente pas un ordre à longue portée à $T \neq 0$ (modèle de Heisenberg isotrope). C'est ce que souligne le théorème de Mermin-Wagner [77]. Si nous souhaitons observer une transition au-delà de $T = 0$, nous devons fixé $D_{zz} \neq 0$. Nous nous plaçons dans cette hypothèse en considérant les fines épaisseurs des strutures sur lesquelles nous réalisons nos simulations, $N_z = 8a$. Nous utilisons les paramètres suivants, $N_0 = 1600$, $D_{zz} = -1$, $J_s = J_c = -1$, $I_0 = K_0 = 0.5$ et $D = 0.35$. La structure est de taille $N_x = N_y = 20a$ et $N_z = 8a$ sans conditions périodiques sur l'axe z. Dans le cas du modèle de Heisenberg, nous observons une transition aux alentours de $T_N \sim 0.79$.
Comme dans la section précédente, nous allons commencer par regarder l'effet de D_1 de part et d'autre de la transition de phase ($T_N^- = 0.75$ et $T_N^+ = 0.85$), sur la résistance R, la vitesse v_x, ainsi que l'énergie moyenne d'interaction des électrons avec leur environnement directe E_{e-i}. Ces résultats sont présentés sur la figure 6.15.

Nous ne notons pas de différences majeures avec le modèle d'Ising. Les différents raisonnements appliqués au cas précédent restent valables avec le modèle de Heisenberg. En revanche, les fluctuations sont légèrement plus prononcées : ceci est dû aux degrés de liberté suplémentaires des spins du réseau. Comme pour le cas d'Ising, on devine le sens des

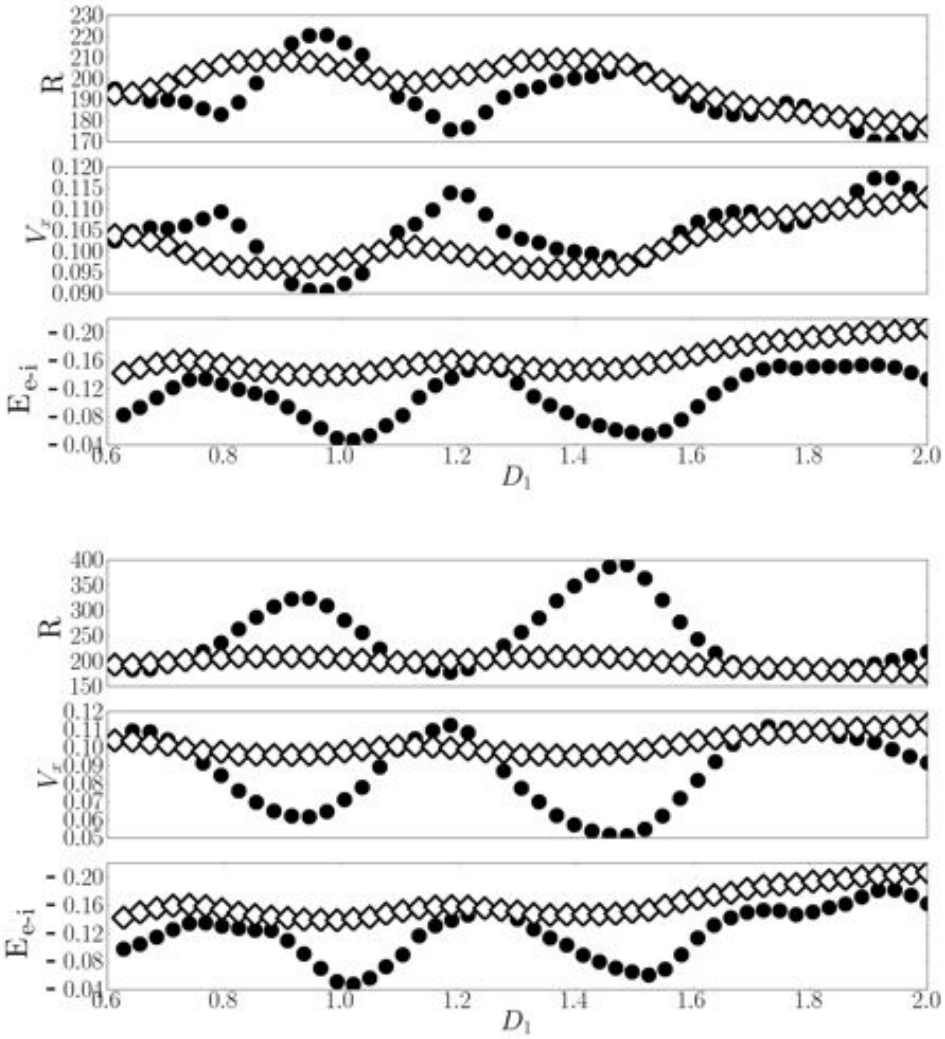

FIGURE 6.15 – *Résistance, vitesse et énergie des spins itinérants en fonction de D_1. Chaque grandeur est tracée pour deux températures, $T_N^- = 0.75$ (ronds noirs) et $T_N^+ = 0.85$ (losanges blancs). Le premier jeu de courbes correspond à l'état dégénéré (1), le second à l'état dégénéré (3).*

transitions en fonction de D_1 pour les deux états (1) et (3). Dans le cas (1), la résistance présentera un saut ou une chute selon la valeur de D_1. Dans le cas (3), la résistance présentera une chute à T_N. Observons que dans le cas d'Ising, l'état (1) ne permettait d'observer que des transitions de type saut de résistance. Le cas de Heisenberg permet d'observer les deux types de transitions. En revanche, pour l'état (3) et contrairement au cas d'Ising, le modèle de Heisenberg ne laisse apparaître qu'un type de transition, une chute de résistance à T_N.

Les courbes de résistance présentent quant à elles, à basses températures, une forte décroissance dans le sens des températures croissantes, comme le souligne la figure 6.16. Comme précédemment, selon la valeur de D_1 les résistances à proximité de T_N subissent une forte décroissance à $D_1 = a$ et des oscillations, ou une légère décroissance à $D_1 = 1.25$. Pour conclure, l'effet de D_{zz} sur les courbes de résistance n'est pas significatif pour des valeurs comprises entre $D_{zz} \in [-0.1; -1.5]$. l'augmentation de D_{zz} a pour effet de déplacer

T_N vers les hautes températures. Ceci se comprend bien car la constante d'anisotropie favorise l'alignement des spins le long d'une direction donnée. Plus cette constante est importante, plus le réseau de spins est rigide, et plus il est nécessaire d'amener de l'énergie pour en détruire l'ordre magnétique. Notons que $D_{zz} \to \infty$ correspond au modèle d'Ising, les spins ne peuvent s'orienter que le long de l'axe z.

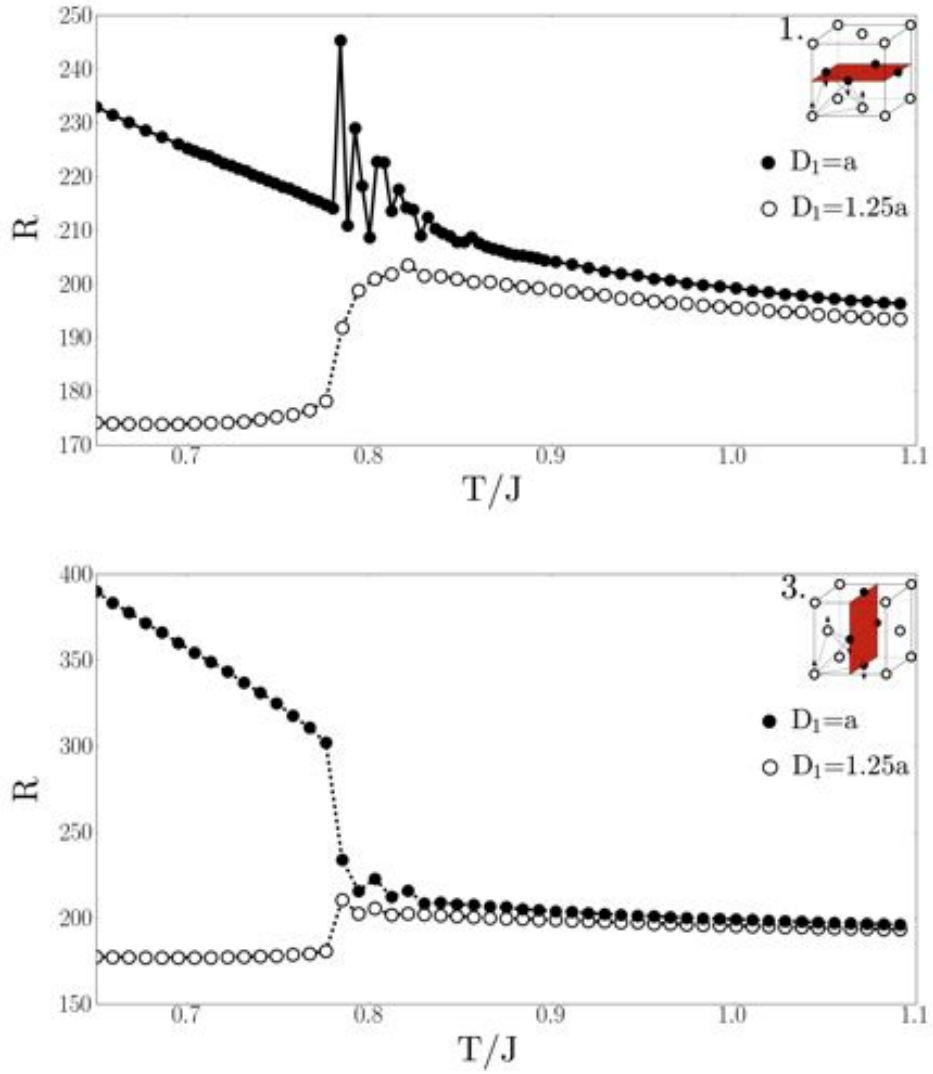

FIGURE 6.16 – *Résistance en fonction de la température pour le modèle de Heisenberg. Pour chaque courbe, nous traçons les résistances pour $D_1 = a$ (ronds noirs) et $D_1 = 1.25a$ (ronds blancs). Le premier jeu de courbes correspond à l'état dégénéré (1), le second à l'état dégénéré (3).*

6.6 Discussion

DANS le cas des ferromagnétiques nous avons vu que R présentait un pic à la température de transition. Nous avons interprété ce pic comme la conséquence d'un phénomène

de localisation des porteurs dans des clusters massifs up qu'exhibe le réseau autour de T_c, [67][68][126][5], ainsi que des correlations des porteurs avec le réseau [24][39][55]. Le même comportement a pu être observé dans les matériaux antiferromagnétiques non-frustrés [47]. Cependant le phénomène de localisation étant réduit dans ce type de structure : nous avons trouvé que le pic était moins prononcé que dans les matériaux ferromagnétiques. De plus, le rayon de la sphère d'interaction englobe plus ou moins de spins up et down selon la valeur que nous lui fixons. Nous avons vu que la variation de ce paramètre contrairement aux matériaux ferromagnétiques avait pour conséquence de produire une oscillation visible sur l'ensemble des observables de transport. Selon la valeur de D_1 pour les antiferromagnétiques, le paysage énergétique peut être boulversé d'une valeur de D_1 à une autre. Dans le cas des systèmes frustrés la modification du régime de transport "conducteur-isolant" peut être responsable de deux types de transitions de phases de R : une transition de saut des basses résistances vers les hautes résistances, ou une transition de chute des hautes résistances vers les basses résistances. Bien que la littérature sur le sujet ne regorge pas d'une abondance d'études théoriques et expérimentales, nous pouvons mentionner quelques articles de référence sur le sujet. La très bonne étude numérique d'Alvarez et al. [4] dans laquelle les auteurs calculent par simulation Monte Carlo la conductance d'un matériau antiferromagnétique frustré par le biais d'un modèle à deux orbitals, et montrent une transition type chute (saut) de résistance (conductance). Une étude expérimentale en bon accord avec les deux types de transitions obtenus par nos travaux de simulation a été réalisée par Akimoto et al. [2] sur un manganite antiferromagnétique frustré présenté sur la figure 6.17. Dans cet article, les auteurs montrent que selon le dopage z de l'alliage $(La_{1-z}Nd_z)_{0.46}Sr_{0.54}MnO_3$ les résistances présentent un saut pour $z = 1$ et une chute pour $z = 0.8$. Nous supposons que le dopage joue qualitativement le même rôle que la variation de D_1. Le matériau plus ou moins dopé présente un paysage magnétique différent qui a pour conséquence d'induire l'une ou l'autre des transitions.
L'étude expérimentale de Fujita et al. [40] sur le matériau antiferromagnétique $TbBaCO_2O_{5+\delta}$ montrée sur leur figure 3 laisse apparaître une transition de chute. Sur cette même figure les auteurs réalisent plusieurs mesures en fonction d'un champ magnétique extérieur. Comme pour les remarques faites sur les antiferromagnétiques, remarquons que la discontinuité est réduite et décalée vers les basses températures avec une augmentation du champ. Une étude similaire traite des perovskites et présente également des transitions de type chute de R à T_N cf. figure 9 de l'article de Martin et al. [70]. Le caractère premier ordre de la transition a également été observé expérimentalement par Granados et al. sur deux matériaux antiferromagnétiques $NdNiO_3$ [42] et $PrNiO_3$ [43]. Enfin une étude très complète réalisée par P. A. Lee et al. résume les propriétés magnétiques des antiferromagnétiques et des transitions metal-isolant [58].

6.7 Conclusion

Dans ce travail concernant les antiferromagnétiques frustrés sur le réseau FCC, nous avons commencé par présenter les caractéristiques principales de ce type de système. Aussi, nous avons remarqué que la frustration cause une grande dégénérescence du système. Notre étude sur les matériaux en couches minces nous a ammené à définir deux constantes de couplage des spins du réseau qui nous ont permi de contrôler l'état dégénéré du système afin d'y effectuer des mesures de transport. Il est apparu que selon l'état dégénéré et

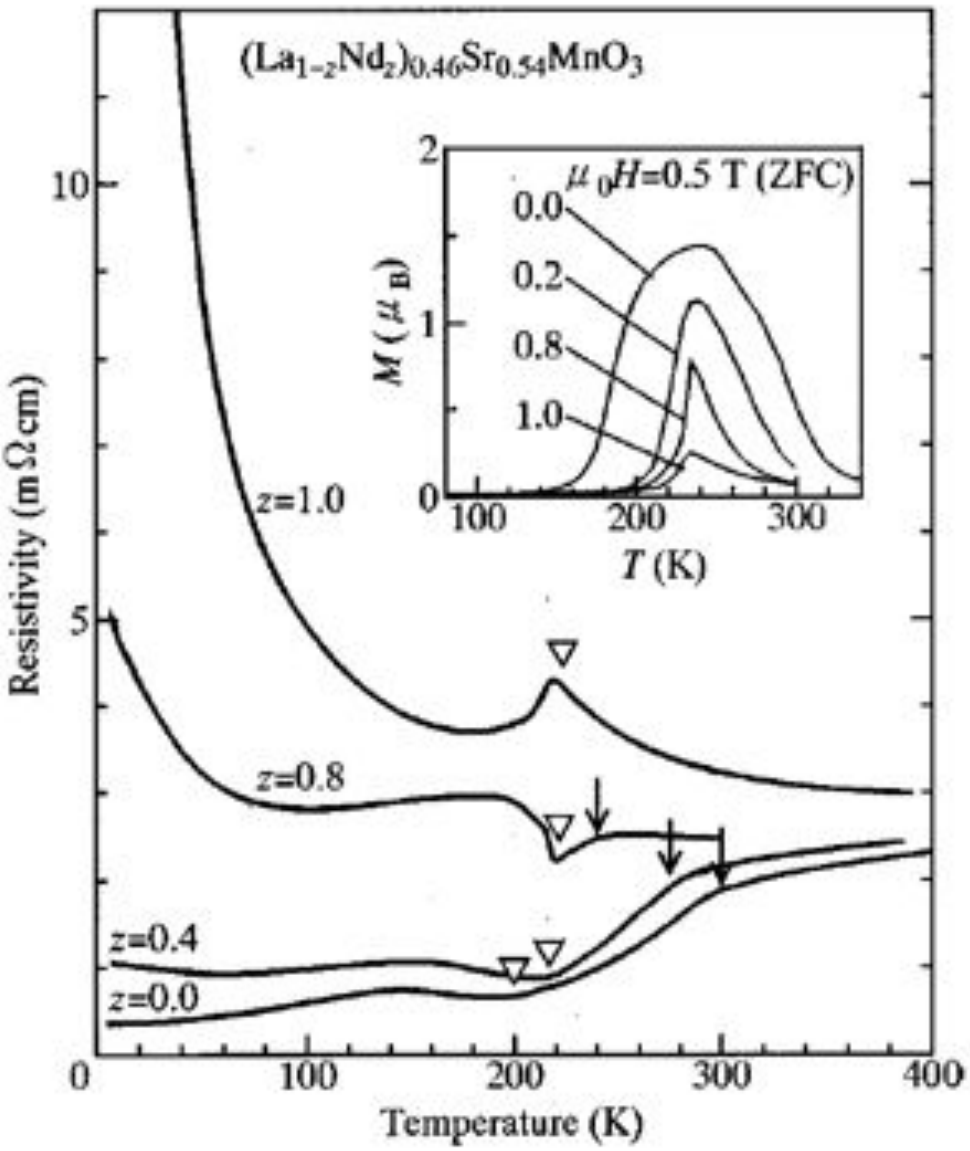

FIGURE 6.17 – *Courbes de résistivités dans un système antiferromagnétique dopé (manganite $(La_{1-z}Nd_z)_{0.46}Sr_{0.54}MnO_3$) présentant deux types de transition fonction de la stœchiométrie z. Courbes tirées de l'article de Akimoto et al. [2].*

le rayon de la sphère d'interaction D_1, la transition peut présenter un comportement antagoniste, un saut ou une chute de résistance, et un comportement similaire à ceux observés lors de transitions métal-isolant. En effet, comme pour les matériaux antiferromagnétiques non-frustrés, le rayon D_1 permet d'inclure dans la sommation des interactions des électrons avec le réseau, des nombres de spins up et down différents, ayant pour effet de produire une oscillation des grandeurs physiques de transport. Cependant, dans le cas des antiferromagnétiques frustrés en couches minces, la dégénérescence du système et des différentes valeurs fixées à D_1 deviennent deux paramètres sensibles qui ont pour effet de provoquer une transition de saut (chute) des résistances vers les hautes (basses) résistances et inversement. Ces comportements ont pu être observés par d'autres auteurs dans des systèmes frustrés tels que $(La_{1-z}Nd_z)_{0.46}Sr_{0.54}MnO_3$ [2]. Un autre point tout

à fait intéressant a été de remarquer que la mécanique de diffusion à la température de transition est totalement différente des systèmes non-frustrés. En effet, nous avons vu que pour les ferromagnétiques ainsi que les antiferromagnétiques non-frustrés, la résistance magnétique présentait un pic dû à la localisation des spins itinérants dans des clusters parallèles du réseau. Dans le cas des systèmes frustrés, le réseau ne présente pas ce type de comportement. Le réseau présente un mélange des phases ordonnées de chaque état dégénéré, plus ou moins propice au transport, dont la taille et la répartition varient tout de suite après la transition provoquant une oscillation de R après T_N.

Chapitre

7 Résistance magnétique dans des multicouches magnétiques

7.1 Introduction à la magnétorésistance

La découverte de la magnétorésistance géante (GMR acronyme de l'anglais giant magneto-resistance) par Albert Fert et al. [10] et Peter Grünberg [45], a permis de donner un nouvel essor aux thématiques de recherche axées sur l'étude du contrôle de la résistance des matériaux magnétiques. Cette découverte a eu un grand impact sur le monde industriel. Elle a rendu possible la fabrication de têtes de lecture très sensibles, capables de lire l'information stockée avec une très haute densité sur des disques durs. La première tête de lecture dite GMR a été commercialisée en 1997. Aujourd'hui plus de 600 millions de têtes de lecture GMR sont fabriquées chaque année.

Le phénomène de magnétorésistance est connu depuis longtemps : on sait, depuis les travaux de Lord Kelvin en 1857, qu'un champ magnétique peut modifier la résistance électrique d'un matériau magnétique comme le fer. Le physicien avait déjà observé que lorsque le champ magnétique est appliqué de façon parallèle au matériau conducteur, la résistance électrique diminue, alors qu'elle augmente si le champ est appliqué perpendiculairement.
Dans les années 1960, les recherches réalisées sur la résistivité liée au magnétisme du réseau cristallin permettent de mettre en évidence le rôle joué par l'interaction des porteurs de spins avec l'ordre magnétique du réseau cristallin. Les observations expérimentales montrent que lorsque l'orientation du spin de l'électron de conduction est parallèle à son environnement magnétique, l'électron se propage aisément à travers un réseau de spins, alors qu'il est fortement ralenti lorsque son environnement est antiparallèle.

C'est l'idée que va exploiter Albert Fert dans les années 1970 sur une structure multicouches ferromagnétiques, composée de Fer et de Nickel. Albert Fert exploite l'idée de modulation de résistivité d'un matériau par application d'un champ magnétique extérieur.

Il existe plusieurs types de magnétorésistance dépendant des matériaux (semi)conducteurs :

- Dans les matériaux non-magnétiques, l'effet principal est appelé magnétoresistance ordinaire. Cet effet dépend de l'intensité de l'induction magnétique appliquée, et de l'angle pris entre champ extérieur et courant électrique. Les mesures réalisées montrent de très fortes résistances avec d'intenses champs magnétiques appliqués, et de très faibles résistances pour les champs faibles [122].

– Dans les ferromagnétiques 3d, on note un autre effet de magnétorésistance dépendant de l'angle formé entre l'orientation des spins du réseau et le courant électrique [74], il s'agit de la magnétorésistance anisotropique. Elle est atribuée au couplage spin-orbite. Pour ce type de magnétorésistance, on observe que la résistivité du matériau est plus faible lorsque le courant et le champ magnétique sont perpendiculaires, que dans le cas où ils sont parallèles.

7.2 Principe de contrôle des multicouches et de la magnétorésistance géante

Un autre effet plus intense, comme nous l'avons évoqué plus haut, a été découvert en 1988 dans des structures constituées d'une alternance de couches Fe/Cr en films minces. Il s'agit de la magnétorésistance géante (GMR) [10][13]. Pour comprendre cet effet, considérons un matériau ferromagnétique. L'origine du magnétisme de ce type de matériau réside dans l'inégalité d'ocupation des états de spins "up" et "down" dans les bandes d'énergie. En conséquence, dans le cas des ferromagnétiques 3d, la densité d'états des spins à la surface de Fermi est asymétrique entre populations de spins de conductions "up" et "down". Dans ces structures, le transport s'effectue avec un type de porteurs de spins majoritaires ("up/down") et un type de porteurs minoritaires ("down/up").

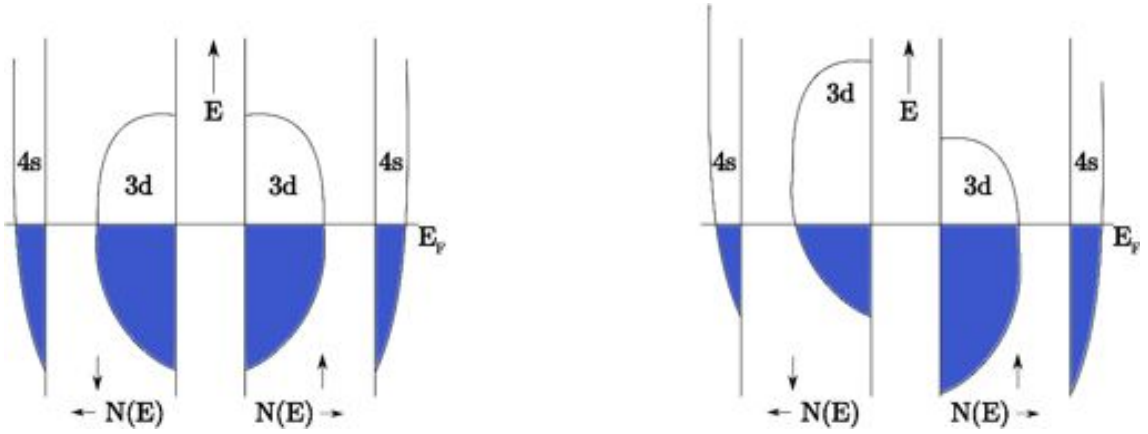

FIGURE 7.1 – *A gauche : représentation de la densité d'états pour un métal 3d non-magnétique. A droite : représentation de la densité d'états pour un ferromagnétique 3d.*

L'inégalité de populations de spins itinérants, entraîne une polarisation du courant (courant de spins "up" / courant de spins "down"), ainsi qu'une résistance polarisée. Expérimentalement, les travaux de 1988 [10][13], ont été réalisés dans une structure composée de deux couches ferromagnétiques séparées d'une fine couche non-magnétique. Tout l'intérêt de ce dispositif réside dans le contrôle de la polarisation des couches ferromagnétiques (parrallèle/antiparallèle).

Une description simple de la dynamique de transport dans ce type de structure peut être énoncée ainsi :
Dans un premier temps, les électrons sont polarisés par la première couche ferromagnétique, on distingue deux densités de porteurs à l'origine de deux courants polarisés. Lorsque les

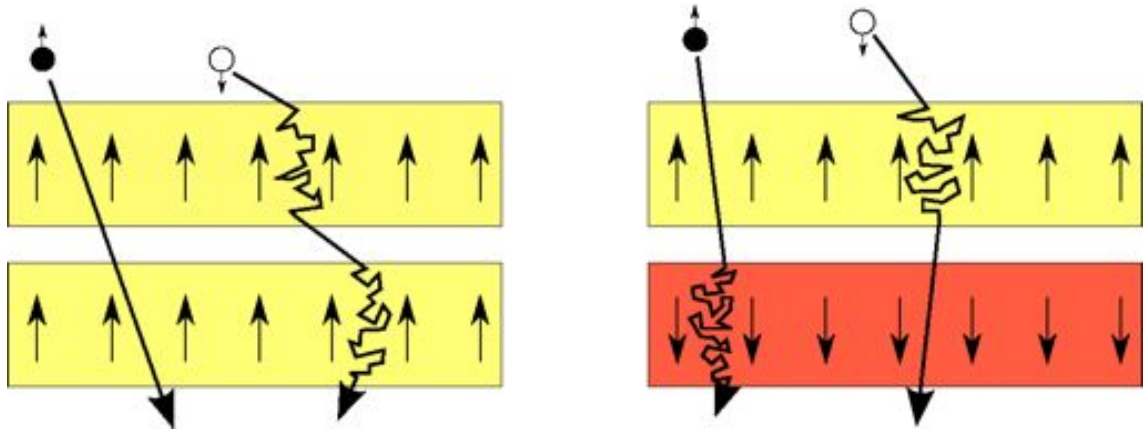

FIGURE 7.2 – *Dynamique des deux courants de spins "up & down" dans un système bi-couches magnétiques parallèle/antiparallèle séparées par une couche non-magnétique.*

électrons traversent la couche non-magnétique, seule une très faible partie des électrons perdent leur polarisation. Lorsque les spins rencontrent la seconde couche magnétique, il résulte une résistance dépendante de l'orientation des spins du réseau. Si les spins de la deuxième couche sont "up", nous observons une bonne circulation des porteurs "up", alors que les porteurs "down" seront fortement ralentis par cette couche magnétique. Actuellement, les travaux de recherche sur la GMR se concentre sur l'étude du rôle joué par les interfaces, et les effets de rugosité sur les mécanismes de diffusion.

Ce chapitre est consacré à l'étude du transport dans un système composé de trois films magnétiques en configuration CPP. Comme pour les autres systèmes présentés, nous nous consacrons à la dépendance de résistance magnétique en fonction de la température, du temps de relaxation du réseau, ainsi que du champ magnétique extérieur. Dans cette étude des systèmes GMR en configuration CPP, nous ignorons dans un premier temps l'évolution temporelle de la densité des deux populations d'électrons "up" et "down". En effet, des études expérimentales réalisées sur différents alliages [32] révèlent que la longueur de diffusion des électrons varient de 4nm pour NiFe, à 140nm pour du Cu. Ces échelles de longueurs sont en bon accord avec l'hypothèse de conservation de polarisation dans la plupart des mécanismes de diffusion.

7.3 Configuration CPP

NOUS étudions dans ce paragraphe une structure constituée de deux couches ferromagnétiques parallèles $i = 1$ et $i = 3$, espacées d'une couche ferromagnétique antiparallèle, $i = 2$. Chaque couche ferromagnétique est couplée antiferromagnétiquement avec la couche anti-parallèle. L'intérêt que présente ce genre de système, est de bloquer la circulation des deux populations de spins itinérants en l'absence de champ magnétique, et d'induire un cumul de spins itinérants le long des interfaces parallèle/antiparallèle, 1/2 et/ou 2/3. Par ailleurs, l'application d'un champ magnétique aura pour effet d'inverser la polarisation de la couche antiparallèle $i = 2$, et de rendre le dispositif conducteur.

Lors de nos simulations, nous utilisons le modèle d'Ising sur un réseau cristallin cubique

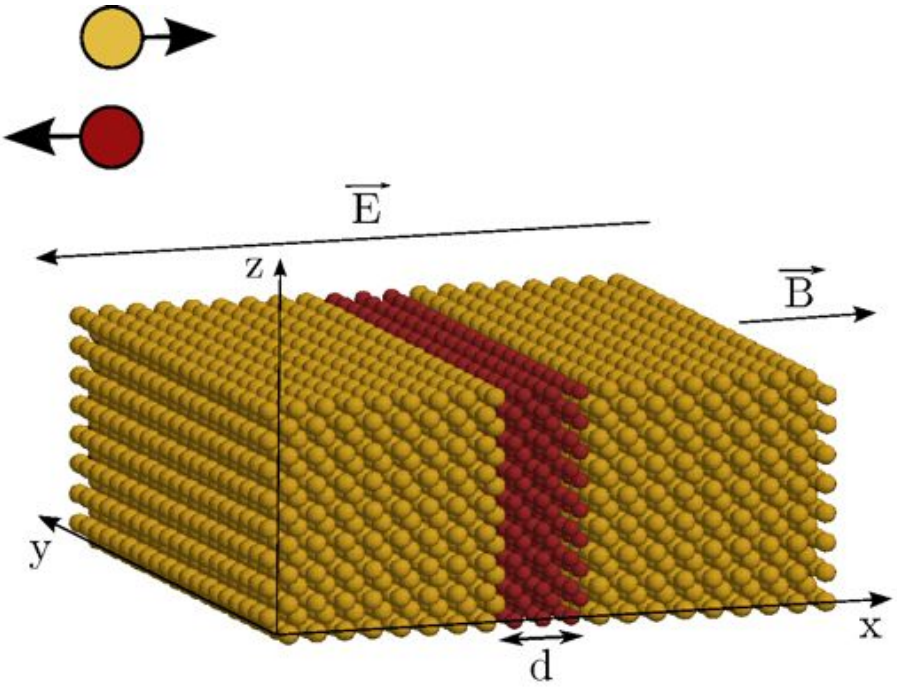

FIGURE 7.3 – *Structure GMR en configuration CPP. La structure est constituée de deux couches ferromagnétiques $i = 1$ et $i = 3$, séparées par un espaceur ferromagnétique antiparallèle $i = 2$, de largeur d. La taille du dispositif en unité de paramètre de maille a est de $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$. Les sites de couleur jaune correspondent aux spins "up" (parallèles à l'axe x), les sites de couleur rouge aux spins "down" (antiparallèles à x). Des champs électrique et magnétique sont appliqués le long de l'axe x.*

centré BCC. Les couches magnétiques sont couplées le long de l'axe x (figure 7.3). Des conditions périodiques sont appliquées sur les axes x et y, ainsi qu'une condition de réflexion mirroir sur l'axe z. Les spins du réseau sont du type Ising $S = \pm 1$ et l'intégrale d'échange est fixée à $J = 1$.

Le jeu de paramètres pour la procédure de transport est choisi tel que : les spins itinérants sont du type Ising $\sigma = \pm 1$, les rayons des sphères d'intéraction électron-réseau et électron-électron, respectivement $D_1 = a$ et $D_2 = a$, le coefficient de diffusion $D = 0.5$, les interactions électron-réseau et électron-électron $I_0 = 2$ et $K_0 = 0.5$, la densité d'électrons dans la structure $\eta = 1/4$ et enfin, le champ électrique $E_x = 2$.

La procédure de simulation utilisée pour la structure CPP reste la même que dans les chapitres précédents. Nous le rappelons ici brièvement. Dans un premier temps, on génère un réseau de spins dans un état initial. On thermalise le réseau sur 10^6 pas Monte Carlo. L'algorithme de Métropolis [87] permet d'amener le système à l'équilibre thermodynamique. Une fois l'équilibre atteint, on procède aux calculs des moyennes des observables sur réseau, puis on injecte N_0 électrons itinérants, accélérés par un champ électrique E_x appliqué le long de l'axe x du réseau. Le déplacement des électrons est conditionné par l'algorithme de Métropolis. Il permet de faire passer un électron d'une position i à une nouvelle position j par comparaison des énergies E_i et E_j. Cette procédure est étendue

à tous les spins itinérants dans de multiples états d'équilibre du réseau $N_{eq} = 2.10^4$. Le nombre de pas Monte Carlo sur les électrons itinérants dans un état d'équilibre donné du réseau, est déterminé par le temps de relaxation, fonction de la température. En effet, selon la température à laquelle est réalisée la simulation, les fluctuations du réseau sont plus ou moins importantes, et le temps pendant lequel un électron peut explorer son environnement magnétique (typiquement le temps nécessaire au réseau pour passer d'un état d'équilibre à nouvel état d'équilibre), varie beaucoup au voisinage de la température critique T_c. Afin de tenir compte de ce paramètre, nous utilisons l'expression suivante [72][110] :

$$\tau_L = \frac{A}{\left|1 - \frac{T}{T_c}\right|^{\nu z}} \tag{7.1}$$

avec $\nu = 0.638$ et $z = 2.02$ qui sont respectivement l'exposant critique de corrélation et l'exposant critique dynamique connus pour le modèle d'Ising 3D. La prise en compte du temps de relaxation du réseau devant celui des électrons itinérants nous permet de tenir compte de l'effet des fluctuations du réseau sur la diffusion des électrons. Nous avons vu aux chapitres précédents que la prise en compte de τ_L est fondamentale pour aboutir à une bonne description des mécanismes de transport de spin.

7.3.1 Comportement en température et sous application d'un champ magnétique des observables du réseau

Commençons par étudier les propriétés thermodynamiques de la structure multicouches en l'absence de spins itinérants. Nous évaluons la température critique T_c à l'aide de l'aimantation M, et de la susceptibilité magnétique du sytème χ. Nous définissons l'aimantation tel que :

$$M = \sum_{i=1}^{3} M_i \tag{7.2}$$

avec M_i l'aimantation du film i. Sur la figure (fig :7.4), nous constatons que l'aimantation du système à champ magnétique nul, et à basse température est fonction de l'épaisseur de la couche antiparallèle $i = 2$. Plus $M_1 + M_3$ (aimantations des couches parallèles) $>$ M_2 (aimantation de la couche antiparallèle), plus l'aimantation moyenne M du système est grande. Par conséquent, une diminution de la largeur d de l'espaceur antiparallèle $i = 2$, aura pour effet d'induire une augmentation de l'aimantation globale de la structure, et inversement. Nous déterminons la température critique T_c grâce à la suceptibilité magnétique, $T_c \sim 6.04$.

On note les effets de taille sur M montrée dans la figure 7.5. La position de la température de transition T_c est une fonction de l'épaisseur N_z du système. En effet, des conditions de réflexion miroir sont appliquées sur les plans xz extérieurs afin traiter notre dispositif CPP comme un système en couches minces. La réduction de l'épaisseur N_z entraîne une diminution de la température de transition T_c. Ceci s'explique par fait que les atomes de surfaces des plans xz ont un manque de voisins par rapport aux atomes situés à l'intérieur

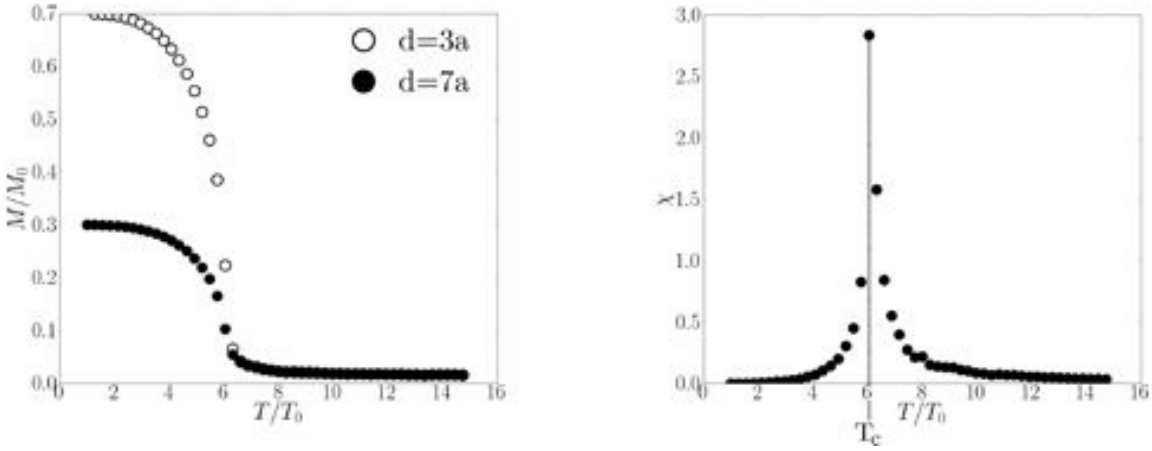

FIGURE 7.4 – *A gauche : courbes d'aimantation du réseau en fonction de la température pour deux largeurs de l'espaceur antiparallèle $i = 2$. A droite : courbe de susceptibilité magnétique en fonction de la température. Ces résultats sont issus d'une simulation sur une structure BCC de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$*

de la structure. Il résulte de ce manque de voisins que l'ordre magnétique des plans de surfaces résistent moins à la température par rapport aux autres plans. Ainsi, plus le rapport de surfaces xz sur le volume de la structure : S_{xz}/V est petit, et plus haute sera la température de transition T_c.

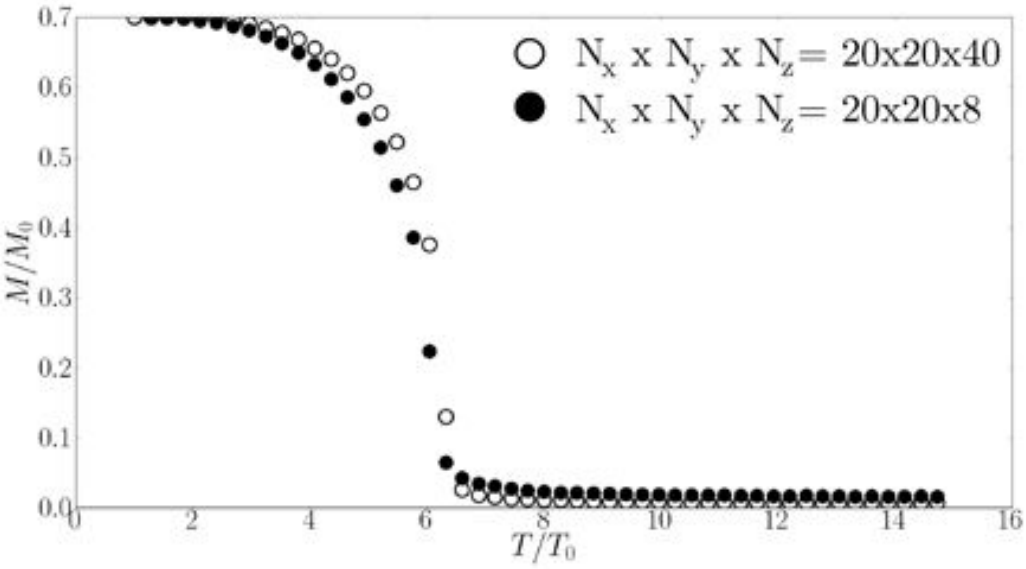

FIGURE 7.5 – *Courbes d'aimantation du réseau versus T pour deux épaisseurs $N_z = 8a$ en noir, et $N_z = 40a$ en blanc.*

La figure 7.6 présente l'effet du champ magnétique sur l'aimantation du système. L'application d'un champ magnétique B_x a pour effet d'orienter parallèlement à ce champ les

spins du réseau, et de faire passer la structure d'une configuration "up/down/up" à une structure ferromagnétique complètement "up". Pour un champ magnétique $B_x = 0.5$, on note sur les courbes d'aimantation un renversement des spins de la couche $i = 2$ à $T_{i=2} \sim 5.8$ et pour un champ magnétique $B_x = 1$, $T_{i=2} \sim 4$.

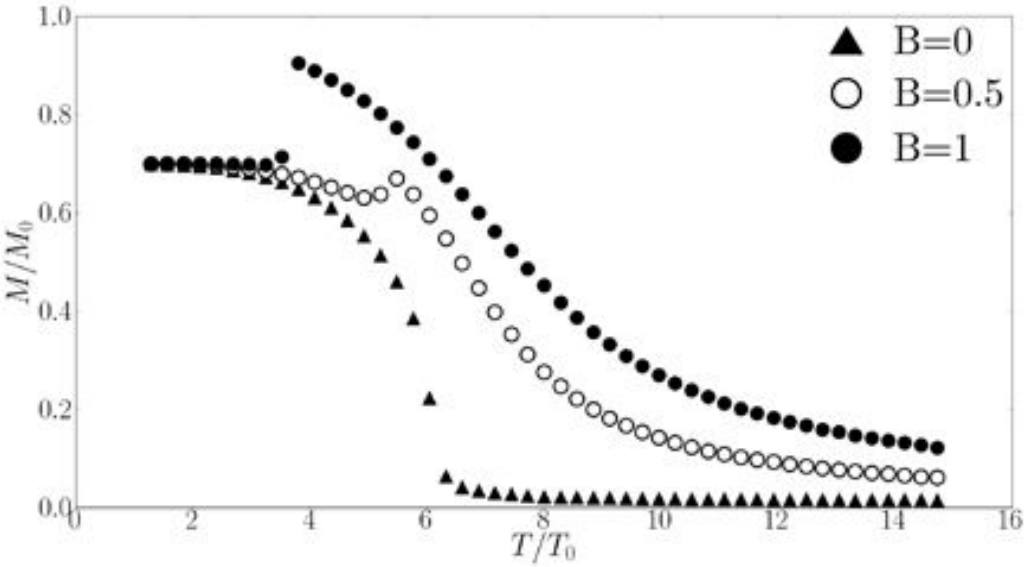

FIGURE 7.6 – *Courbes d'aimantation du réseau pour différentes valeurs de champs magnétique B_x, obtenues à partir de structure de taille $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 8a$ avec un espaceur antiparallèle $d = 3a$. Les triangles noirs correspondent à un champ magnétique $B_x = 0$, les points blancs à $B_x = 0.5$, les points noirs à $B_x = 1$.*

7.3.2 Transport et dynamique des électrons dans une configuration CPP

Electrons polarisés

Avant de présenter les résistances magnétiques en configuration CPP, nous allons observer l'évolution de la densité d'électrons couche par couche le long de l'axe x de la structure, pour différentes températures. Dans ce premier cas, nous ne tenons compte que d'une population de porteurs "up". Une fois le réseau CPP thermalisé, nous injectons $N_0 = 1600$ électrons itinérants aléatoirement dans la structure. Les électrons sont dans un premier temps accélérés par le champ électrique E_x. Comme le montre la figure 7.7, lors des premières itérations $t \sim 0$, la densité d'électrons est relativement homogène le long de l'axe x. Cette première phase correspond à la thermalisation des électrons. Suite à cette phase de thermalisation ($t \sim 200$), nous pouvons constater une forte densité d'électrons le long de la paroi $i = 1/i = 2$, et une zone de déplétion derrière la couche $i = 2$. Ceci signifie que les électrons susceptibles de traverser la paroi antiparallèle sont d'une part entraînés par le champ électrique à la sortie de la couche $i = 2$, et que d'autre part, l'interface antiferromagnétique séparant les couches $i = 2$ et $i = 3$, est énergétiquement

défévorable pour les électrons itinérants, expliquant l'existence de cette zone de déplétion.

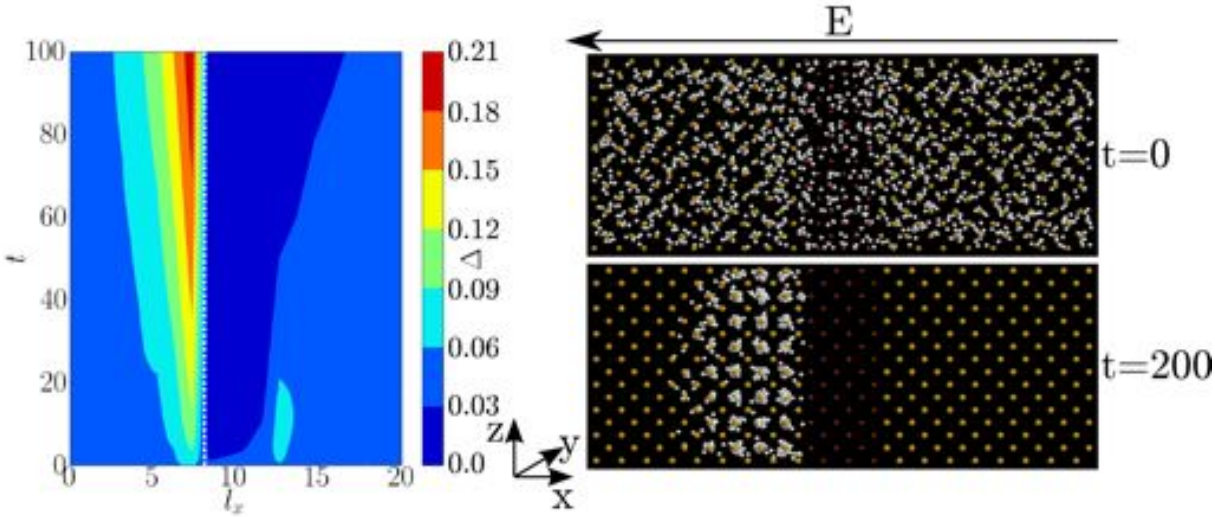

FIGURE 7.7 – *A gauche, carte de densité des spins itinérants* Δ*, le long de l'axe* x *et en fonction du temps. A droite, structures CPP 3D au temps* $t = 0$ *(en haut), et* $t = 200$ *(en bas). Les points jaunes et rouges correspondent respectivement aux spins "up" et "down" du réseau. Les points blancs, aux spins itinérants polarisés "up".*

A basse température, avant la transition T_c, les électrons se propageant le long de x rencontrent la couche antiparrallèle $i = 2$, par laquelle ils se trouvent stoppés. On observe un maximum de la densité Δ à l'interface de la couche parrallèle $i = 1$, avec la couche antiparrallèle $i = 2$. La variation de densité sur une longueur δx de quelques couches atomiques avant l'interface, est due à la compétition entre le terme de champ électrique qui tend à accumuler les électrons le long de la paroi parallèle/antiparrallèle $i = 1/i = 2$, et le terme de répulsion électron-électron qui tend à les diffuser.

A mesure que la température augmente (cf. figure 7.8), l'ordre magnétique de la couche $i = 2$ est fragilisé. On note une diminution de la densité d'électrons, fonction de la température, le long de la paroi. Au-delà de la température de transition T_c, la densité d'électrons devient homogène dans toute la structure. Les trois couches magnétiques sont en phase paramagnétique, et les électrons diffusent avec une même probabilité quelles que soient leurs positions.

L'application d'un champ magnétique a pour effet de modifier l'ordre magnétique du réseau, et de réduire l'aimantation antiparallèle de la couche $i = 2$. Ceci se traduit sur nos résultats par une diminution en température de la zone de concentration d'électrons le long de la paroi (cf. figure 7.8). Le champ magnétique tend à renverser les spins antiparallèles de la couche $i = 2$, favorisant la circulation des électrons le long de x.
On note également que selon l'intensité du champ magnétique appliqué, le réseau conserve une mémoire de la paroi magnétique $i = 2$, même au-delà de T_c. Une explication de ce phénomène peut être énoncé ainsi : le couplage entre les zones ferromagnétiques $i = 1$ et $i = 2$, ainsi que $i = 2$ et $i = 3$, est de nature antiferromagnétique. L'application d'un champ magnétique a pour effet de "casser" le couplage antiferromagnétique des deux

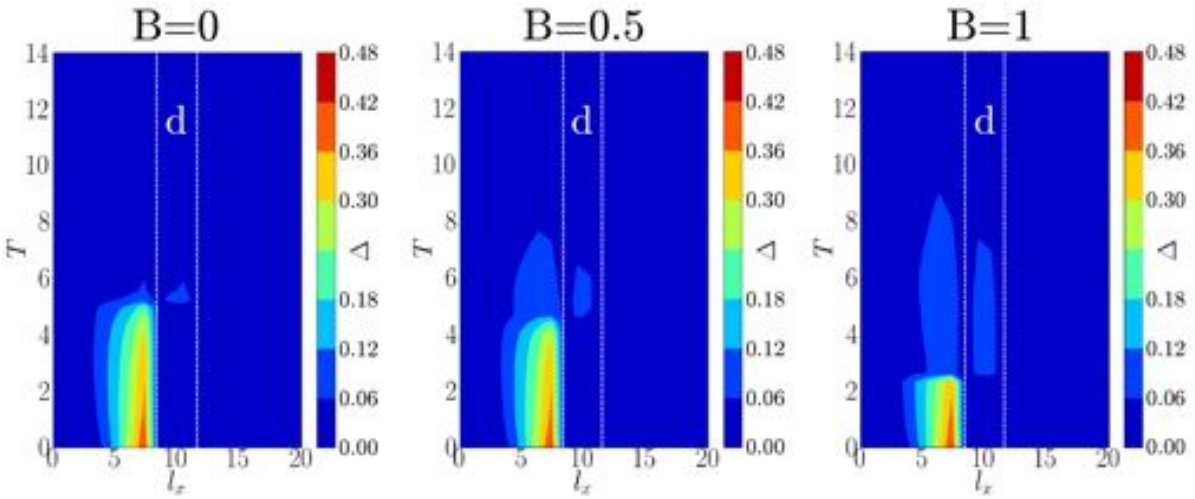

FIGURE 7.8 – *De gauche à droite, cartes de densités de spins itinérants polarisés "up" Δ le long de l'axe x, en fonction de la température. Les cartes correspondent aux valeurs de champs magnétique : $B_x = 0$, $B_x = 0.5$, $B_x = 1$.*

parois, mais le couplage selon la température reste plus ou moins effectif. Ceci a pour conséquence de retenir les électrons à l'entrée et à la sortie de la couche $i = 2$. C'est ce qui explique le phénomène résiduel observé sur les densités électroniques de la figure 7.8.

Electrons non-polarisés

Nous reprenons le même traitement que dans le cas précédent mais en laissant la possibilité aux spins des électrons itinérants de se retourner. Après thermalisation de la structure, nous injectons aléatoirement $N_0 = 1600$ électrons portant un spin aléatoire $\sigma = \pm 1$. Après thermalisation des positions des électrons dans la structure, on observe à basses températures deux densités de spins le long de l'axe x comme le présente la figure 7.9. La densité localisée avant la couche $i = 2$ correspond à la densité de spins "up" $\Delta_\uparrow$, et la densité comprise à l'intérieur de l'espaceur antiparallèle $i = 2$, correspond à la densité de spins "down $\Delta_\downarrow$.
A champ magnétique nul, les deux densités de spins sont similaires, $\Delta_\uparrow \sim \Delta_\downarrow$. Comme dans le cas précédent, les deux densités baissent avec l'augmentation de la température, et deviennent homogènes après la température critique T_c. En revanche, l'application d'un champ magnétique B_x va polariser et réduire la population de spins "down". On observe sur les cartes de densités d'électrons, la densité $\Delta_\downarrow$ diminue avec l'augmentation du champ magnétique.

On remarque également une évolution des grandeurs telles que vitesses moyennes sur l'axe x, et résistances des deux populations de spins avec la température. A champ magnétique nul et basse températures, la vitesse des deux populations est quasi nulle. Les électrons "up" accumulés dans $i = 1$ sont stoppés par la paroi antiparallèle $i = 2$, alors que les électrons "down" localisés dans la couche $i = 2$ sont stoppés par la paroi $i = 3$. L'augmentation de la température a pour effet de désordonner certains spins du réseau au sein des trois couches magnétiques $i = 1, 2, 3$. Ces spins désordonnées (spins magnétiques

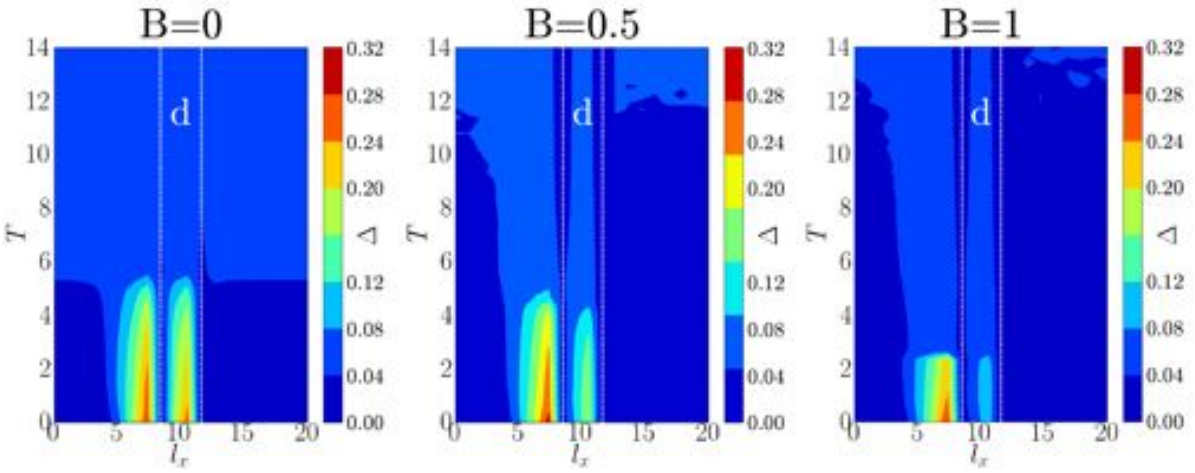

FIGURE 7.9 – *De gauche à droite, cartes de densités de spins itinérants non-polarisés* Δ *le long de l'axe* x*, en fonction de la température. Les cartes correspondent aux valeurs de champs magnétique :* $B_x = 0$*,* $B_x = 0.5$*,* $B_x = 1$*.*

locaux anti-parallèles) vont induire le déplacement des deux populations d'électrons. Sur les figures 7.10 - 7.11, on remarque que la population de spins "up" se propage plus facilement que la population "down". Ceci est en accord avec la taille des couches magnétiques du réseau. Comme nous l'avons déjà souligné, dans ce type de structure, les électrons se propagent aisément dans un milieu dont l'aimantation est parallèle aux spins itinérants. La taille l des couches "up" étant supérieure à la longueur de la couche antiparrallèle : $l_{i=1} + l_{i=2} > l_{i=3}$, la population de spins "up" se déplacera sur de plus longues distances que la population "down". Dans la phase paramagnétique, à haute température, la vitesse des deux populations se superposent. Nous nous attendions à ce résultat puisque quelle que soit la polarisation des spins itinérants, l'état magnétique du réseau diffuse équiprobablement les deux populations.

L'application d'un champ magnétique (cf. figure 7.12) a pour effet de fragiliser l'ordre ferromagnétique antiparallèle de la couche $i = 2$. Plus les champs appliqués sont intenses, plus les électrons "up" circulent facilement le long de l'axe x de la structure et plus les résistances mesurées sont basses. On trouve naturellement le comportement inverse pour la population de spins "down". Plus la structure tend à être dans un état ferromagnétique "up" sous l'action d'un champ, et plus les électrons de la population "down" sont ralentis, donnant lieu à une augmentation de la résistance magnétique de la structure.
Les courbes de résistances magnétiques sont en bon accord avec les courbes précédentes (figure 7.13). En effet, nous pouvons voir la vitesse moyenne des électrons comme proportionellement inverse à la résistance. La résistance de la population de spins "up" décroît donc plus rapidement avec l'augmentation de la température que la population "down". A haute température, on note que les deux résistances saturent pour une même valeur.

Nous comparons enfin les courbes des résistances magnétiques, dans le cas d'électrons itinérants polarisés et non-polarisés. Avant la transition, la résistance des spins polarisés augmente beaucoup plus rapidement que dans le cas où les spins ne sont pas polarisés. Ceci se comprend bien dans la mesure où un électron ayant la capacité de changer l'orientation de son spin selon l'environnement magnétique dans lequel il évolue, se déplacera

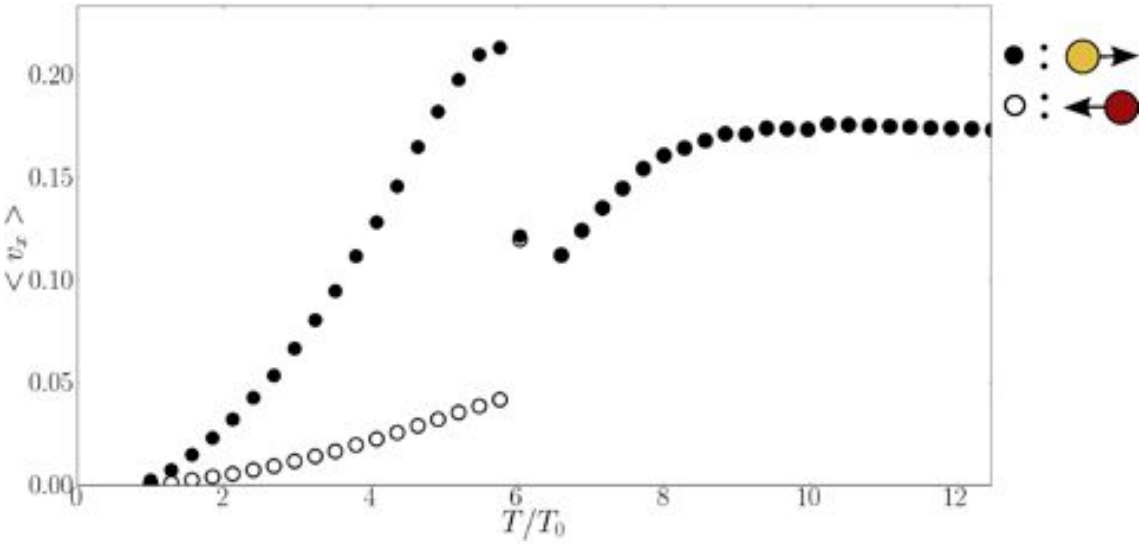

FIGURE 7.10 – *Courbes des vitesses moyennes des électrons le long de l'axe x en fonction de la température, à champ magnétique nul. Les points noirs correspondent à la population de spins "up", les points blancs à la population de spins "down".*

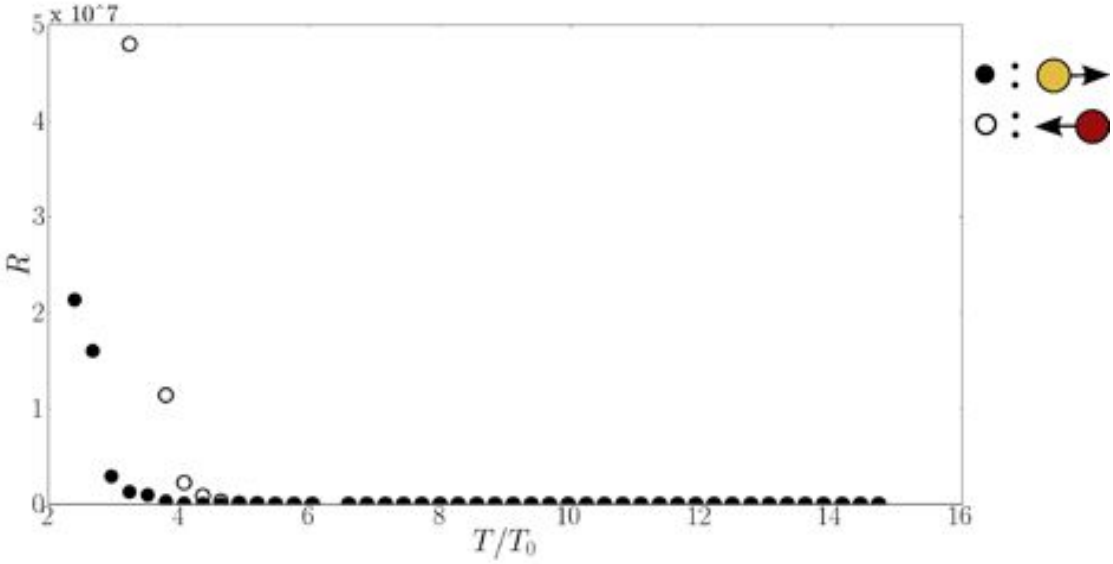

FIGURE 7.11 – *Courbes des résistances en fonction de la température, à champ magnétique nul. Les points noirs correspondent à la résistance de la population de spins "up", les points blancs à la résistance de la population de spins "down".*

plus facilement qu'un électron polarisé. Au-delà de la transition, le réseau est dans un état paramagnétique. Quelle que soit la polarisation des spins itinérants, ces derniers interagissent de façon équiprobable avec autant de spins "up" et "down" du réseau. On ne distingue pas de différences de résistances après T_c. Au voisinage de la température de transition, l'environnement magnétique du réseau peut être décrit comme un champ

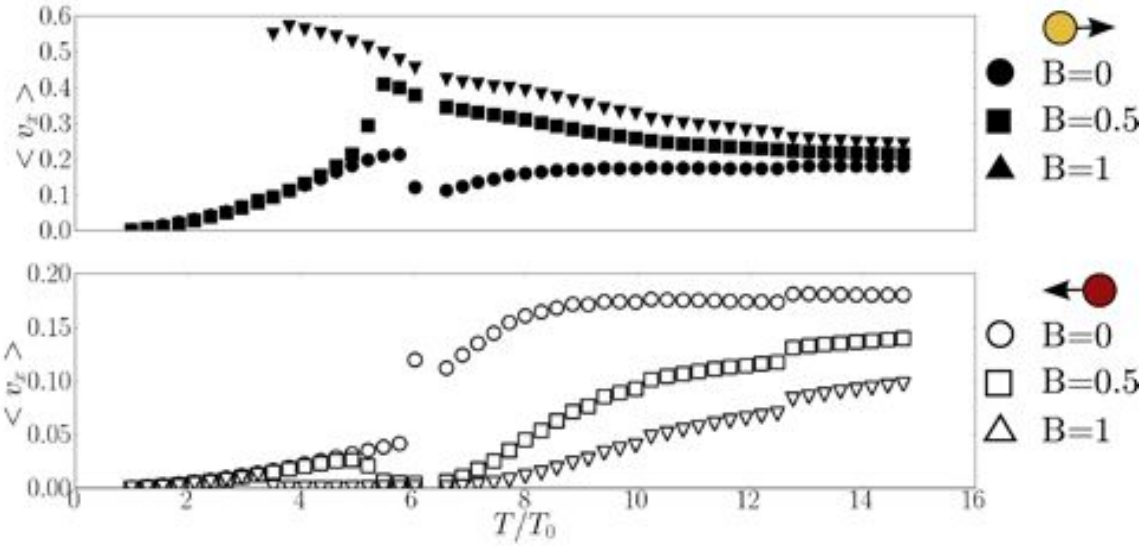

FIGURE 7.12 – *Courbes des vitesses moyennes des électrons le long de l'axe x en fonction de la température, pour trois valeurs de champ magnétique : $B_x = 0$ (points), $B_x = 0.5$ (carrés), $B_x = 1$ (triangles). Les courbes noires correspondent à la population de spins "up", les courbes blanches à la population de spins "down".*

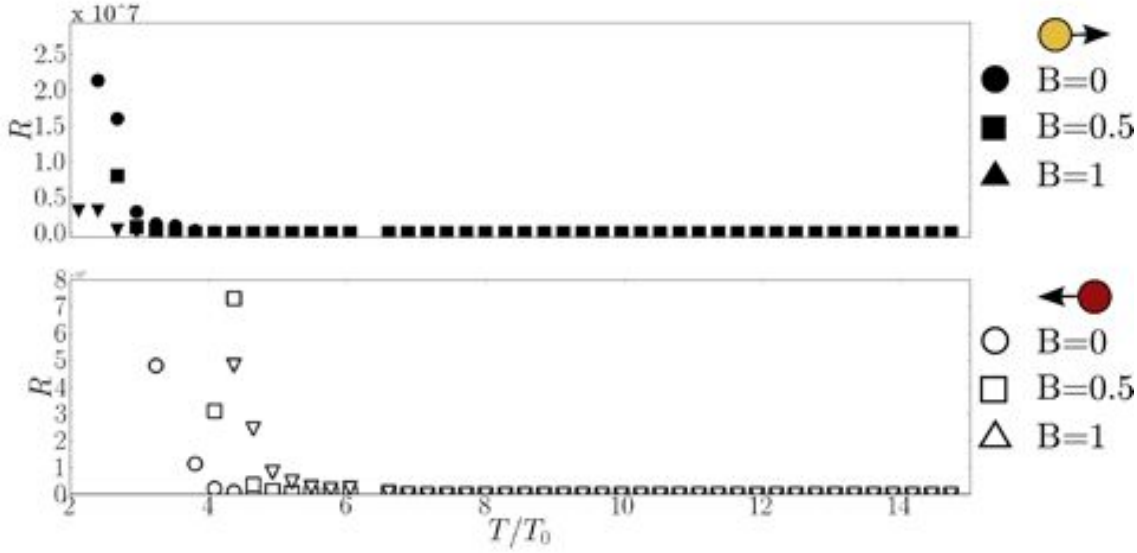

FIGURE 7.13 – *Courbes de résistance en fonction de la température, pour trois valeurs de champ magnétique : $B_x = 0$ (points), $B_x = 0.5$ (carrés), $B_x = 1$ (triangles). Les courbes noires correspondent aux résistances de spins "up", les courbes blanches aux résistances de spins "down".*

d'amas de spins "up" et "down", dont le temps de relaxation diverge selon l'équation 7.1. Les spins de conduction se propagent alors longuement dans une même configuration magnétique et se retrouvent piégés dans des amas de spins "up" du réseau, donnant lieu

au pic de résistance observé à la température de transition T_c. En comparaison, le pic de résistance des électrons polarisés est plus important que dans le cas non-polarisé. Ceci se comprend aisément dans la mesure où un électron polarisé piégé dans un amas "up" du réseau n'a que peu de chance d'en sortir, quand un électron non-polarisé peut retourner son spin et passer d'un amas à un autre amas de polarisation inverse. Cependant, notons que la différence de hauteur de pics entre les cas polarisé et non-polarisé n'est pas notable. Un électron non-polarisé malgré sa capacité à renverser sa polarisation se heurte à une paroi antiferromagnétique (énergétiquement défavorable) entre deux amas de spins opposés du réseau. Le nombre de spins dans ces endroits n'est qu'une faible partie de l'ensemble.

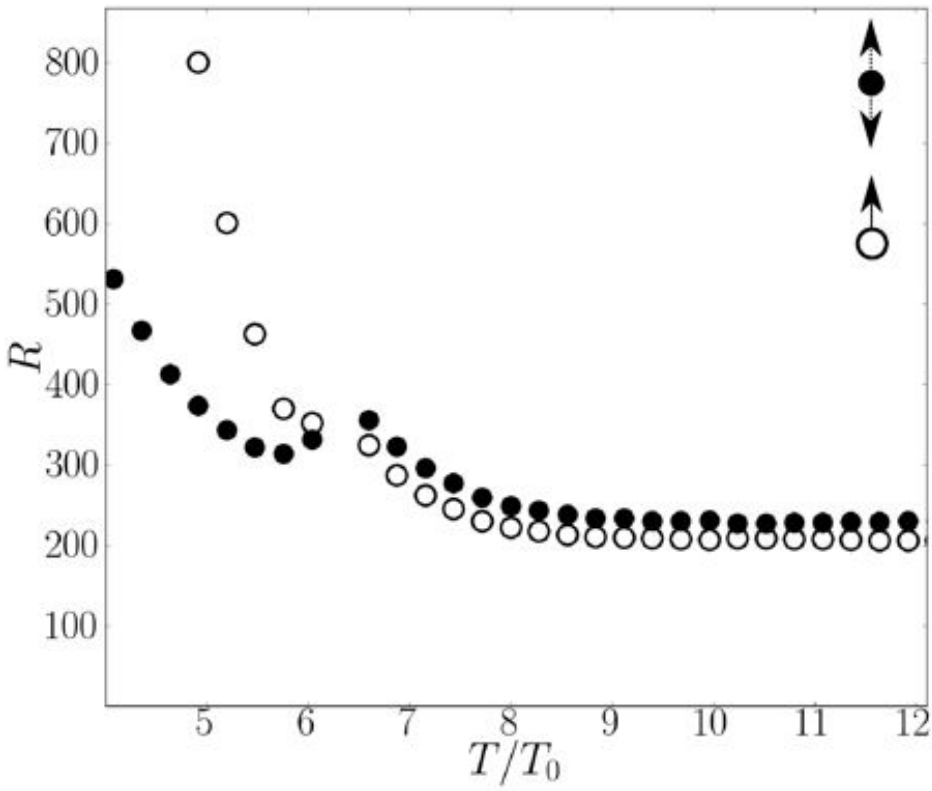

FIGURE 7.14 – *Courbes de résistance magnétique en fonction de la température pour le cas de spins itinérants non-polarisés (points noirs), et de spins polarisés (points blancs).*

Conclusion générale

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse sont centrés autour de la question de la dépendance en température de la résistance magnétique des matériaux magnétiques avec un accent mis sur les semiconducteurs magnétiques. Ils sont dédiés en particulier au transport de spin et aux mécanismes de diffusion prenant part autour de la température critique ordre/désordre magnétique du réseau. En effet, comme nous l'avons souligné dans les chapitres 1 et 2, la résistance magnétique des métaux, des semiconducteurs, des systèmes en passant par les systèmes dilués offre une variété riche de comportements qui posent encore des questions aujourd'hui, et auxquelles il est nécessaire de répondre en vue d'optimiser les dispositifs dans le domaine de la spintronique tels que disques durs, capteurs magnétiques, etc... Depuis les années 1950, de nombreuses théories ont tentés d'expliquer les comportements des résistances magnétiques observés expérimentalement dans les différentes familles de matériaux magnétiques. On peut par exemple citer la théorie de Fisher et Langer [39] qui rend bien compte du comportement de la résistance magnétique dans les métaux, sans pic de résistance à la température de transition, ou la théorie de Haas [46] qui rend compte de la présence d'un pic de résistance à la température critique pour les semiconducteurs ferromagnétiques. Cependant, si l'ensemble des théories rendent plus ou moins bien compte des caractérisations expérimentales des différents matériaux magnétiques, il existe autant de théories que de matériaux (métaux, semiconducteurs, ...), ou de type de structures magnétiques (ferromagnétiques, antiferromagnétiques, ...), de plus ces théories ne sont efficaces que sur une gamme restreinte de températures.
Nous avons vu que les différents mécanismes proposés successivement par Kasuya, De Gennes et Friedel, Fisher et Langer ou encore Kataoka pour les systèmes ferromagnétiques ont permis d'ouvrir la voie à cette thématique de recherche en imposant l'idée de la **forte dépendance entre ordre magnétique du réseau, et la forme de la résistance magnétique en fonction de la température**. Notons hélas que les théories concernant les semiconducteurs antiferromagnétiques (Suezaki, Mori et Haas) échouent à rendre compte des résultats expérimentaux. Il est à noter que selon le mécanisme proposé en vue d'expliquer le comportement de la résistance observé, la méthode théorique doit s'y adapter. Une méthode générale pour tous les matériaux faisait encore cruellement défaut. **Notre contribution à ce problème est essentielle : la méthode Monte Carlo proposée dans cette thèse peut traiter un grand nombre de systèmes complexes sans avoir à supposer un mécanisme à priori. Il suffit de définir les interactions et laisser le système évoluer tout seul.** Avec un jeu de paramètres d'entrées appropriées, nous sommes en mesure par le biais de la méthode Monte Carlo Métropolis de reproduire de façon générique les tendances expérimentales présentes dans la littérature pour des semiconducteurs ferromagnétiques et antiferromagnétiques, frustrés et non-frustrés. Egalement, la méthode permet une étude systématique de matériaux caractérisés expérimentalement avec prise en compte des unités afin de réaliser des comparaisons directes entre nos résultats de simulations et les mesures expérimentales, avec un bon

accord de forme et de grandeur, par exemple dans le cas du semiconducteur magnétique MnTe. Si cette thèse se limite à l'étude de matériaux semiconducteurs, nos perspectives vont consister à étendre l'étude aux systèmes dilués DMS, très étudiés aujourd'hui, ainsi qu'aux problèmes de diffusion aux interfaces dans les dispositifs GMR, problématique qui soulève actuellement de nombreuses questions. **A ce jour notre démarche est unique et semble capable de rendre compte des comportements de résistivité expérimentale en particulier pour le cas des semi-conducteurs, de fournir une nouvelle explication quant à la controverse liée aux mécanismes de diffusion électronique autour de la température critique.**

Ma contribution principale porte sur les points suivants :

- Mise au point d'une méthode Monte Carlo avec des techniques qui réduisent des fluctuations statistiques des échantillons (multi-step averaging) présenté au chapitre 3 [67].

- Etude des différents types de matériaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques non-frustrés, chapitre 4 [67].

- Observation des comportements très marquants autour de Tc et à basse T : la dépendance de la forme du pic à Tc dépend des variables physiques bien identifiées (interactions : portée, nature ; temps de relaxation, réseau, ...), chapitre 4 [68]

- Etude de l'effet de la frustration sur la résistivité, chapitre 6 [66].

- Effet d'une transition du premier ordre sur la résistivité [50].

- Interprétation du comportement de la résistivité utilisant les données numériques notamment en terme de clusters et de temps de relaxation [68] [1].

- Etude quantitative de MnTe et comparaison avec l'expérience : accord parfait, chapitre 5, un article est en préparation.

Développons ces points succintements. Le premier point sur lequel je voudrais insister, est l'interprétation nouvelle en ce qui concerne les mécanismes de diffusion à proximité des températures de transition ordre/désordre pour les réseaux non-frustrés. En effet, j'ai mis en évidence lors de ma thèse que la forme du pic de résistivité autour de Tc est une conséquence directe de deux effets liés au magnétisme du réseau. Autour de Tc le réseau percole et présente de larges clusters de spins parallèles (antiparallèles) qui représentent autant de zones de basses (hautes) énergies pour les électrons qui s'y propagent. En addition les spins du réseau subissent un ralentissement critique qui rend l'évolution du paysage magnétique extrêmement lent. Le ralentissement critique des fluctuations des spins du réseau fige le paysage magnétique et permet aux spins itinérants de se localiser dans les clusters parallèles (basses énergies) et d'y être piégés, donnant naissance à un pic de résistivité à Tc. En conséquence nous soulignons que l'étude de transport dans les systèmes magnétiques doit tenir compte du paysage énergétique local du réseau magnétique, ainsi que de la dynamique des fluctuations des spins en fonction de la température (ce dont ne tenaient pas compte les travaux ultérieurs). C'est deux points

nous permettent un traitement généralisé de la résistivité dans les systèmes non-frustrés.

Quant aux systèmes antiferromagnétiques frustrés, ils se caractérisent par un grand nombre d'états dégénérés (souvent infini pour des spins d'Ising). Cependant, la structure en couches minces du système nous permet de rendre cette dégénérescence finie. Nous mettons premièrement en évidence que la dégénérescence du système induit une transition de résistivité du premier ordre, et que selon l'état dégénéré du système, la résistivité peut présenter deux types de transition : une transition allant des basses résistivités vers les hautes résistivités, dans le sens des températures croissantes, ou inversement. Soulignons que ce type de matériau peut présenter un intérêt dans l'élaboration de système tel que les rams assistées par la chaleur.

Liste des publications

- *Monte Carlo Study of the Spin Transport in Magnetic Materials*
  Y. Magnin, K. Akabli,H. T. Diep and Isao Harada.
  Comp. Mat. Sci. **49**, S204-S209 (2010).

- *Spin Resistivity in Frustrated Antiferromagnets*
  Y. Magnin, K. Akabli, H. T. Diep and Isao Harada.
  Phys. Rev. B **83**, 144406 (2011)

- *Spin transport in magnetically ordered systems : effect of the lattice relaxation time*
  Y. Magnin, Hoang D.-T., Diep H. T.
  Modern. Phys. Letters B. Volume : **25** Issue : 12-13 Pages : 1029-1040 (2011).

- *Spin resistivity in the Frustrated J1-J2 Model*
  Danh-Tai Hoang, Y. Magnin and H. T. Diep
  Modern. Phys. Letters B. Volume : **25** Issue : 12-13 Pages : 937-945 (2011).

- *Monte Carlo Spin Transport in Antiferromagnetic Films : Application to MnTe*
  K. Akabli, Y. Magnin, H. T. Diep and Isao Harada.
  Phys. Rev. B **84**, 024428 (2010).

- *Perpandicular spin transport in exchange-biased magnetic multilayers*
  Y. Magnin, H. T. Diep.
  J. Appl. Phys. Lett. (2011), In preparation.

- *Direct Monte Carlo simulation of spin transport in MnTe*
  Y. Magnin, H. T. Diep.
  J. Appl. Phys. Lett. (2011), In preparation.

Bibliographie

Bibliographie

[1] K. Akabli, Y. Magnin, Masataka Oko, Isao Harada, and H. T. Diep. Theory and simulation of spin transport in antiferromagnetic semiconductors : Application to mnte. *Phys. Rev. B*, 84(2) :024428, Jul 2011.

[2] T. Akimoto, Y. Maruyama, Y. Moritomo, a. Nakamura, K. Hirota, K. Ohoyama, and M. Ohashi. Antiferromagnetic metallic state in doped manganites. *Physical Review B*, 57(10) :R5594–R5597, March 1998.

[3] S. Alexander, JS Helman, and I. Balberg. Critical behavior of the electrical resistivity in magnetic systems. *Physical Review B*, 13(1) :304, 1976.

[4] G. Alvarez, H. Aliaga, C. Şen, and E. Dagotto. Fragility of the A-type AF and CE phases of manganites : Insulator-to-metal transition induced by quenched disorder. *Physical Review B*, 73(22) :1–12, June 2006.

[5] G. Alvarez and E. Dagotto. Single-band model for diluted magnetic semiconductors : Dynamical and transport properties and relevance of clustered states. *Physical Review B*, 68(4) :1–13, July 2003.

[6] Gonzalo Alvarez, Horacio Aliaga, and Elbio Dagotto. Colossal Magnetoresistance Observed in Monte Carlo Simulations of the One- and Two-Orbital Models for Manganites. *Physics*, pages 1–15, 2008.

[7] A. Amith and L. Friedman. Mixed-Conduction Model for Charge Transport in n-Type $CdCr_2Se_4$. *Physical Review B*, 2(2) :434, 1970.

[8] P. W. Anderson and H. Hasegawa. Considerations on double exchange. *Phys. Rev.*, 100(2) :675–681, Oct 1955.

[9] S. S. Aplesnin, L. I. Ryabinkina, O. B. Romanova, D. a. Balaev, O. F. Demidenko, K. I. Yanushkevich, and N. S. Miroshnichenko. Effect of the orbital ordering on the transport and magnetic properties of MnSe and MnTe. *Physics of the Solid State*, 49(11) :2080–2085, November 2007.

[10] MN Baibich, JM Broto, A Fert, and FN Van Dau. Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 61(001) :2472–2475, 1988.

[11] S A Baily and M B Salamon. Berry's phase contribution to the anomalous Hall effect of gadolinium. *Arxiv preprint arXiv :0903.2500*, 61801 :1–6, 2008.

[12] A. Barthélémy, A. Fert, J-P. Contour, M. Bowen, V. Cros, J. M. De Teresa, A. Hamzic, J. C. Faini, J. M. George, J. Grollier, F. Montaigne, F. Pailloux, F. Petroff, and C. Vouille. Magnetoresistance and spin electronics. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 242-245(Part 1) :68 – 76, 2002.

[13] G Binasch, P Grünberg, F Saurenbach, and W Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical review. B, Condensed matter*, 39(7) :4828–4830, March 1989.

[14] Richard Bouzerar, Frantisek Máca, Josef Kudrnovský, and Lars Bergqvist. Effect of p-anion codoping on the curie temperature of gamnas diluted magnetic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 82(3) :035207, Jul 2010.

[15] I. A. Campbell. Hall effect and resistivity anisotropy in ni alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 24(6) :269–271, Feb 1970.

[16] I. A. Campbell. Resistivity and relaxation in spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 47(20) :1473–1475, Nov 1981.

[17] I. A. Campbell, P. J. Ford, and A. Hamzić. Resistivity of spin-glasses. *Phys. Rev. B*, 26(9) :5195–5206, Nov 1982.

[18] Sergio Caracciolo, Andrea Pelissetto, and Alan D. Sokal. A general limitation on monte carlo algorithms of the metropolis type. *Phys. Rev. Lett.*, 72(2) :179–182, Jan 1994.

[19] K. Carva, I. Turek, J. Kudrnovský, and O. Bengone. Disordered magnetic multilayers : Electron transport within the coherent potential approximation. *Phys. Rev. B*, 73(14) :144421, Apr 2006.

[20] S Chandra, Lk Malhotra, S Dhara, and Ac Rastogi. Low-temperature dynamic susceptibility of thin Cd1-xMnxTe films. *Physical review. B, Condensed matter*, 54(19) :13694–13704, November 1996.

[21] G. F. Chen, Z. Li, D. Wu, G. Li, W. Z. Hu, J. Dong, P. Zheng, J. L. Luo, and N. L. Wang. Superconductivity at 41 K and Its Competition with Spin-Density-Wave Instability in Layered CeO_{1-x}F_{x}FeAs. *Physical Review Letters*, 100(24) :1–4, June 2008.

[22] R. V. Colvin, Sam Legvold, and F. H. Spedding. Electrical resistivity of the heavy rare-earth metals. *Phys. Rev.*, 120(3) :741–745, Nov 1960.

[23] B. Smit D. Frenkel. *Understanding Molecular Simulation*, volume 25. Academic press, September 2002.

[24] PG De Gennes and J. Friedel. Anomalies de résistivité dans certains métaux magn\'\iques. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 4(1-2) :71–77, 1958.

[25] H. T. Diep and H. Kawamura. First-order phase transition in the fcc heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 40(10) :7019–7022, Oct 1989.

[26] H.T. Diep. *Physique de la matière condensée*. Dunod edition, 2003.

[27] HT Diep. *Frustrated spin systems*. World Scientific Pub Co Inc, 2004.

[28] Bernard Diu, Claudine Guthmann, Danielle Lederer, and Bernard Roulet. *Elements de Physique Statistique*. Collection enseignements des sciences, 37. 1989, 2001.

[29] K. Binder D.P. Landau. *A guide to Monte Carlo in Statistical Physics*. Cambridge University press, 2005.

[30] JBC D'Sa, PA Bhobe, KR Priolkar, A Das, SK Paranjpe, RB Prabhu, and PR Sarode. Low Temperature Neutron Diffraction Study of MnTe. *Arxiv preprint cond-mat/0408124*, (February 2008) :1–8, 2004.

[31] Juan Du, Da Li, Yao Li, Nai Sun, Ji Li, and Zhi Zhang. Abnormal magnetoresistance in ϵ-(Mn1-xFex)3.25Ge antiferromagnets. *Physical Review B*, 76(9) :1–5, September 2007.

[32] S. Dubois, L. Piraux, J. M. George, K. Ounadjela, J. L. Duvail, and A. Fert. Evidence for a short spin diffusion length in permalloy from the giant magnetoresistance of multilayered nanowires. *Phys. Rev. B*, 60 :477–484, Jul 1999.

[33] H. Ehrenreich and F. Spaepen. *Solid state physics*, volume 56. Academic Pr, 2001.

[34] H. Englisch. Liebmann, r., statistical mechanics of periodic frustrated ising systems. berlin-heidelberg-new york-tokyo, springer-verlag 1986. 142 s., vii abb., dm 28,–. isbn 3-540-16473-1 (lecture notes in physics 251). *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 67(12) :616–616, 1987.

[35] C Felser. Giant Negative Magnetoresistance in GdI2 : Prediction and Realization. *Journal of Solid State Chemistry*, 147(1) :19–25, October 1999.

[36] A. Fert and I. A. Campbell. Two-current conduction in nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 21(16) :1190–1192, Oct 1968.

[37] A. Fert and I. A. Campbell. Two-current conduction in nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 21(16) :1190–1192, Oct 1968.

[38] A. Fert and I. A. Campbell. Two-current conduction in nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 21(16) :1190–1192, Oct 1968.

[39] M.E. Fisher and JS Langer. Resistive anomalies at magnetic critical points. *Physical Review Letters*, 20(13) :665–668, 1968.

[40] Toshiaki Fujita, Minoru Soda, and Masatoshi Sato. Anomalous Hall Resistivity of TbBaCo 2 O 5.53 with Nontrivial Magnetic Structure. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(11) :114710, November 2006.

[41] D. A. Goodings. Electrical resistivity of ferromagnetic metals at low temperatures. *Phys. Rev.*, 132(2) :542–558, Oct 1963.

[42] X. Granados, J. Fontcuberta, X. Obradors, Ll. Mañosa, and J. Torrance. Metallic state and the metal-insulator transition of NdNiO3. *Physical Review B*, 48(16) :11666–11672, October 1993.

[43] X. Granados, J. Fontcuberta, X. Obradors, and JB Torrance. Metastable metallic state and hysteresis below the metal-insulator transition in $PrNiO_3$. *Physical Review B*, 46(24) :15683, 1992.

[44] Laurent Gravier, Santiago Serrano-Guisan, Fran çois Reuse, and Jean-Philippe Ansermet. Thermodynamic description of heat and spin transport in magnetic nanostructures. *Phys. Rev. B*, 73(2) :024419, Jan 2006.

[45] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, and H. Sowers. Layered magnetic structures : Evidence for antiferromagnetic coupling of fe layers across cr interlayers. *Phys. Rev. Lett.*, 57(19) :2442–2445, Nov 1986.

[46] C. Haas. Spin-disorder scattering and magnetorsistance of magnetic semiconductors. *Physical Review*, 168(2) :168, 1968.

[47] X He, Y Q Zhang, and Z D Zhang. Magnetic and Electrical Behavior of MnTe. *Small*, 27(1) :64–68, 2011.

[48] B. Hennion, W. Szuszkiewicz, E. Dynowska, E. Janik, and T. Wojtowicz. Spin-wave measurements on MBE-grown zinc-blende structure MnTe by inelastic neutron scattering. *Physical Review B*, 66(22) :1–16, December 2002.

[49] a T Hoang. Metal-insulator transitions in the half-filled ionic Hubbard model. *Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal*, 22(9) :095602, March 2010.

[50] Danh-Tai Hoang, Yann Magnin, and H. T. Diep. Spin Resistivity in the Frustrated J1 - J2 Model. *Modern Physics Letters B*, 25(12n13) :937, 2011.

[51] J. Hoshen and R. Kopelman. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B*, 14(8) :3438, 1976.

[52] T. A. Kaplan. Classical spin-configuration stability in the presence of competing exchange forces. *Phys. Rev.*, 116(4) :888–889, Nov 1959.

[53] T. Kasuya. Electrical resistance of ferromagnetic metals. *Progress of Theoretical Physics*, 16 :58–63, 1956.

[54] T. KASUYA. Effects of sd interaction on transport phenomena. *Progress of theoretical physics*, 22(2) :227–246, 1959.

[55] Mitsuo Kataoka. Resistivity and magnetoresistance of ferromagnetic metals with localized spins. *Physical Review B*, 63(13) :1–13, March 2001.

[56] MP Kawatra, JA Mydosh, and JI Budnick. Electrical Resistivity near the Magnetic Transition of Some Rare-Earth Laves Phase Compounds. *Physical Review B*, 2(3) :665, 1970.

[57] H.-H. Klauss, H. Luetkens, R. Klingeler, C. Hess, F. Litterst, M. Kraken, M. Korshunov, I. Eremin, S.-L. Drechsler, R. Khasanov, a. Amato, J. Hamann-Borrero, N. Leps, a. Kondrat, G. Behr, J. Werner, and B. Büchner. Commensurate Spin Density Wave in LaFeAsO : A Local Probe Study. *Physical Review Letters*, 101(7) :1–4, August 2008.

[58] Patrick A. Lee. Disorder electronic systems. *Reviews of Modern Physics*, 57(2) :287, 1985.

[59] S. Legvold, FH Spedding, F. Barson, and JF Elliott. Some Magnetic and Electrical Properties of Gadolinium, Dysprosium, and Erbium Metals. *Reviews of Modern Physics*, 25(1) :129, 1953.

[60] H. W. Lehmann. Semiconducting properties of ferromagnetic $cdcr_2se_4$. *Phys. Rev.*, 163(2) :488–496, Nov 1967.

[61] G. Li, S.-J. Feng, F. Liu, Y. Yang, R.-K. Zheng, T. Qian, X.-Y. Guo, and X.-G. Li. Insulator-metal transition shift related to magnetic polarons in La 0.67- xY xCa 0.33MnO 3. *The European Physical Journal B*, 32(1) :5–11, February 2003.

[62] Y. Li, Y. Zhang, N. Sun, Q. Zhang, D. Li, J. Li, and Z. Zhang. Ferromagnetic semiconducting behavior of Mn1-xCrxTe compounds. *Physical Review B*, 72(19) :1–4, November 2005.

[63] P. B. Littlewood. *Acta Phys. Pol*, 97(7), 2000.

[64] M. López-Sancho and L. Brey. Temperature dependence of the dielectric constant and resistivity of diluted magnetic semiconductors. *Physical Review B*, 68(11) :1–4, September 2003.

[65] C. Lu, X. Chen, S. Dong, K. Wang, H. Cai, J.-M. Liu, D. Li, and Z. Zhang. Ru-doping-induced ferromagnetism in charge-ordered La0.4Ca0.6MnO3. *Physical Review B*, 79(24) :1–6, June 2009.

[66] Y. Magnin, K. Akabli, and H. Diep. Spin resistivity in frustrated antiferromagnets. *Physical Review B*, 83(14) :1–9, April 2011.

[67] Y. Magnin, K. Akabli, H.T. Diep, and I. Harada. Monte Carlo study of the spin transport in magnetic materials. *Computational Materials Science*, 49(4) :S204–S209, October 2010.

[68] Yann Magnin, Danh-Tai Hoang, and H. T. Diep. Spin Transport in Magnetically Ordered Systems : Effect of the Lattice Relaxation Time. *Modern Physics Letters B*, 25(12n13) :1029, 2011.

[69] P. Majumdar. *nature*, 395 :479, 1998.

[70] C. Martin, A. Maignan, M. Hervieu, S. Hébert, A. Kurbakov, G. André, F. Bourée-Vigneron, J. Broto, H. Rakoto, and B. Raquet. Phase separation and magneto-resistivity in Sm0.1Ca0.9-xSrxMnO3. *Physical Review B*, 77(5) :2–11, February 2008.

[71] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, and Y. Sugawara. Transport properties and origin of ferromagnetism in (ga,mn)as. *Phys. Rev. B*, 57(4) :R2037–R2040, Jan 1998.

[72] R. Matz, D. L. Hunter, and Naeem Jan. The dynamic critical exponent of the three-dimensional Ising model. *Journal of Statistical Physics*, 74(3-4) :903–908, February 1994.

[73] Michael McGuire, Andrew Christianson, Athena Sefat, Brian Sales, Mark Lumsden, Rongying Jin, E. Payzant, David Mandrus, Yanbing Luan, Veerle Keppens, Vijayalaksmi Varadarajan, Joseph Brill, Raphaël Hermann, Moulay Sougrati, Fernande Grandjean, and Gary Long. Phase transitions in LaFeAsO : Structural, magnetic, elastic, and transport properties, heat capacity and Mössbauer spectra. *Physical Review B*, 78(9) :1–10, September 2008.

[74] T. Mcguire and R. Potter. Anisotropic magnetoresistance in ferromagnetic 3d alloys. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 11(4) :1018–1038, 1975.

[75] K. P. McKenna, L. A. Michez, G. J. Morgan, and B. J. Hickey. Quantum transport simulation based on an equation of motion method : An application to current-perpendicular-to-the-plane giant magnetoresistance. *Phys. Rev. B*, 72(5) :054418, Aug 2005.

[76] GT Meaden, KV Rao, and KT Tee. Effects of the Néel Transition on the Thermal and Electrical Resistivities of Cr and Cr : Mo Alloys. *Physical Review Letters*, 25(6) :359–362, 1970.

[77] D Mermin. Abscence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22) :1133–1136, 1966.

[78] D. L. Mills, A. Fert, and I. A. Campbell. Temperature dependence of the electrical resistivity of dilute ferromagnetic alloys. *Phys. Rev. B*, 4(1) :196–201, Jul 1971.

[79] Uichiro Mizutani. Introduction to the Electron Theory of Metals. *Society*, 2001.

[80] S. R. Mobasser and T. R. Hart. Raman scattering from phonons and magnons in magnetic semiconductors, MnTe. 524 :137–144, January 1985.

[81] T. L. Monchesky, A. Enders, R. Urban, K. Myrtle, B. Heinrich, X.-G. Zhang, W. H. Butler, and J. Kirschner. Spin-dependent transport in fe and $fe?au$ multilayers. *Phys. Rev. B*, 71(21) :214440, Jun 2005.

[82] Yukitoshi Motome and Nobuo Furukawa. Critical Temperature of Ferromagnetic Transition in Three-Dimensional Double-Exchange Models. *Journal of the Physics Society Japan*, 69(12) :3785–3788, December 2000.

[83] N F Mott. A discussion of the transition metals on the basis of quantum mechanics. *Proceedings of the Physical Society*, 47(4) :571–588, July 1935.

[84] E.L. Nagaev. Colossal-magnetoresistance materials : manganites and conventional ferromagnetic semiconductors. *Physics Reports*, 346(6) :387–531, June 2001.

[85] WJ Nellis and S. Legvold. Thermal Conductivities and Lorenz Functions of Gadolinium, Terbium, and Holmium Single Crystals. *Physical Review*, 180(2) :581, 1969.

[86] JJ Neumeier, MF Hundley, and JD Thompson. Substantial pressure effects on the electrical resistivity and ferromagnetic transition temperature of La_ {1-x} Ca_ {x} MnO_ {3}. *Physical Review B*, 52(10) :7006–7009, 1995.

[87] Nicholas Metropolis, Adriana W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, and H.Teller and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal Of Chemical Physics*, 21(6) :197–202, February 1953.

[88] H.E. Nigh, S. Legvold, and FH Spedding. Magnetization and electrical resistivity of gadolinium single crystals. *Physical Review*, 132(3) :1092, 1963.

[89] Im Nolden and Rj Silbey. Simulation of spin diffusion in a disordered system. *Physical review. B, Condensed matter*, 54(1) :381–387, July 1996.

[90] M.R. Oliver, JO Dimmock, AL McWhorter, and TB Reed. Conductivity studies in europium oxide. *Physical Review B*, 5(3) :1078, 1972.

[91] T. Omiya. *physica (amsterdam)*, 7E :976, 2000.

[92] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4) :117–149, Feb 1944.

[93] Paul P. Craig, Walter I. Goldburg, T. A. Kitchens and J. I. Budnick. Transport properties at critical points : the resistivity of nickel. *Physical Review Letters*, 19(23) :1334–1337, July 1967.

[94] T. Perring, G. Aeppli, Y. Moritomo, and Y. Tokura. Antiferromagnetic Short Range Order in a Two-Dimensional Manganite Exhibiting Giant Magnetoresistance. *Physical Review Letters*, 78(16) :3197–3200, April 1997.

[95] Alla E. Petrova, E. D. Bauer, Vladimir Krasnorussky, and Sergei M. Stishov. Behavior of the electrical resistivity of *mnsi* at the ferromagnetic phase transition. *Phys. Rev. B*, 74(9) :092401, Sep 2006.

[96] X. Pham Phu, V. Ngo, and H. Diep. Crossover from first- to second-order transition in frustrated Ising antiferromagnetic films. *Physical Review E*, 79(6) :1–8, June 2009.

[97] Noëlle Pottier. *Physique statistique hors équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire.*

[98] T. G. Richard and D. J. W. Geldart. Resistive anomalies at the critical point of isotropic ferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 30(7) :290–294, Feb 1973.

[99] T. G. Richard and D. J. W. Geldart. Theory of spin-fluctuation resistivity near the critical point of binary alloys and antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 15(3) :1502–1513, Feb 1977.

[100] Tiffany Santos, Steven May, J. Robertson, and Anand Bhattacharya. Tuning between the metallic antiferromagnetic and ferromagnetic phases of La1-xSrxMnO3 near x=0.5 by digital synthesis. *Physical Review B*, 80(15) :1–7, October 2009.

[101] H. Sato, M. Tamura, N. Happo, T. Mihara, M. Taniguchi, T. Mizokawa, A. Fujimori, and Y. Ueda. Electronic structure of nias-type mnte. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 140-144(Part 1) :153 – 154, 1995. International Conference on Magnetism.

[102] F. C. Schwerer and L. J. Cuddy. Spin-disorder scattering in iron- and nickel-base alloys. *Phys. Rev. B*, 2(6) :1575–1587, Sep 1970.

[103] Yang Gon Seo, Gyoung Ho Kum, and Nigel A. Seaton. Monte carlo simulation of transport diffusion in nanoporous carbon membranes. *Journal of Membrane Science*, 195(1) :65 – 73, 2002.

[104] Y. Shapira and TB Reed. Resistivity and Hall Effect of EuS in Fields up to 140 kOe. *Physical Review B*, 5(12) :4877, 1972.

[105] S. Skalski, M. P. Kawatra, J. A. Mydosh, and J. I. Budnick. Electrical resistivity of $pdfe$ alloys. *Phys. Rev. B*, 2(9) :3613–3619, Nov 1970.

[106] G. Jeffrey Snyder, T. Caillat, and J.-P. Fleurial. Thermoelectric, transport, and magnetic properties of the polaron semiconductor $fexcr3 - xse4$. *Phys. Rev. B*, 62(15) :10185–10193, Oct 2000.

[107] J A Souza and R F Jardim. Magnetoresistivity in the clustered state of La. *Physical Review B*, (February) :1–7, 2005.

[108] D. A. Stewart, W. H. Butler, X.-G. Zhang, and V. F. Los. Interfacial scattering in magnetic multilayers and spin valves. *Phys. Rev. B*, 68(1) :014433, Jul 2003.

[109] X Tao, C Feng, P Cai, B Yang, and G Ye. Anomalous electrical transport properties of a quenched iron film system. *Solid State Communications*, 131(7) :419–423, August 2004.

[110] C. Thomsen. Critical exponents and percolation thresholds in two-dimensional systems with a finite interplane coupling. *Physical Review E*, 65(6) :1–4, June 2002.

[111] E. A. Turov. *izv akad nauk sssr ser fiz*, 19 :426, 1955.

[112] E. Uchida, H. Kondoh, and N. Fukuoka. Magnetic and Electrical Properties of Manganese Telluride. *Journal of the Physical Society of Japan*, 11(1) :27–32, 1956.

[113] J Vannimenus and G Toulouse. Theory of the frustration effect. ii. ising spins on a square lattice. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 10(18) :L537, 1977.

[114] J. Vergés, V. Martín-Mayor, and L. Brey. Lattice-Spin Mechanism in Colossal Magnetoresistive Manganites. *Physical Review Letters*, 88(13) :2–5, March 2002.

[115] J Villain. Spin glass with non-random interactions. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 10(10) :1717, 1977.

[116] P. Vulliet, J. Sanchez, D. Braithwaite, M. Amanowicz, and B. Malaman. Pressure-induced metallization and collapse of the antiferromagnetic state of MnTe2. *Physical Review B*, 63(18) :3–7, April 2001.

[117] X. Wang, T. Wu, G. Wu, H. Chen, Y. Xie, J. Ying, Y. Yan, R. Liu, and X. Chen. Anisotropy in the Electrical Resistivity and Susceptibility of Superconducting BaFe2As2 Single Crystals. *Physical Review Letters*, 102(11) :100–103, March 2009.

[118] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, 79(2) :357–364, Jul 1950.

[119] Thomas Wolfram and Joseph Callaway. Exchange narrowing of d bands in antiferromagnets. *Phys. Rev.*, 130(1) :45–49, Apr 1963.

[120] a. L. Wysocki, R. F. Sabirianov, M. van Schilfgaarde, and K. D. Belashchenko. First-principles analysis of spin-disorder resistivity of Fe and Ni. *Physical Review B*, 80(22) :1–10, December 2009.

[121] Y. Suezaki and H. Mori. Dynamic Critical Phenomena in Magnetic Systems. II. *Progress of Theoretical Physics*, 41(5) :1177, 1969.

[122] F. Y. Yang, Kai Liu, C. L. Chien, and P. C. Searson. Large magnetoresistance and finite-size effects in electrodeposited single-crystal bi thin films. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :3328–3331, Apr 1999.

[123] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press, Oxford, 1992.

[124] Akio Yoshimori. A new type of antiferromagnetic structure in the rutile type crystal. *Journal of the Physical Society of Japan*, 14(6) :807–821, 1959.

[125] D. A. Zakheim, I. V. Rozhansky, and S. A. Gurevich. Monte-carlo simulation of electron transport and field effect in granular metal nanostructures. *Microelectronic Engineering*, 69(2-4) :646 – 652, 2003. Proceedings of the Symposium and Summer School on : Nano and Giga Challenges in Microelectronics Research and Opportunities in Russia.

[126] Gergely Zaránd, Cătălin Moca, and Boldizsár Jankó. Scaling Theory of Magnetoresistance in Disordered Local Moment Ferromagnets. *Physical Review Letters*, 94(24) :1–4, June 2005.

[127] Y. Zhang, Z. Zhang, and J. Aarts. Charge-order melting and magnetic phase separation in thin films of Pr0.7Ca0.3MnO3. *Physical Review B*, 79(22) :5–9, June 2009.

[128] Cengiz Şen, Gonzalo Alvarez, Horacio Aliaga, and Elbio Dagotto. Colossal magnetoresistance observed in Monte Carlo simulations of the one- and two-orbital models for manganites. *Physical Review B*, 73(22) :1–12, June 2006.