

# Recherche

Dr. Yann Magnin

---

**Mots clefs :** Transport de spins ; Simulation Monte Carlo ; Résistivité Magnétique ; Matériaux Magnétiques ; Equation de Boltzmann.

---

Lors de ma thèse, j'ai étudié les mécanismes de diffusion de courants de spins dans différents types de réseaux magnétiques (principalement pour des ferromagnétiques et antiferromagnétiques), par le biais de simulations Monte Carlo.

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 [7,8,9,10,11,12,13]. 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 lieux au voisinage de la température de transition ordre/désordre magnétique restent encore mal compris.

L'objectif de ma thèse a consisté à étudier ce problème à l'aide d'une approche nouvelle basée sur la simulation Monte Carlo.

En collaboration avec Hung The Diep, Isao Harada, Kalid Akabli and Danh-Tai Hoang, nous avons élaboré un algorithme reposant sur le modèle semiclassique. Cette approche nous a offert une procédure unifiée concernant l'étude des résistivités magnétiques en fonction de la température.

Dans un premier temps, je me suis concentré sur l'étude de semiconducteurs ferromagnétiques [1,4]. Nous avons été en mesure d'interpréter différents comportements de la résistance magnétique en fonction de la température, figure 1.A :

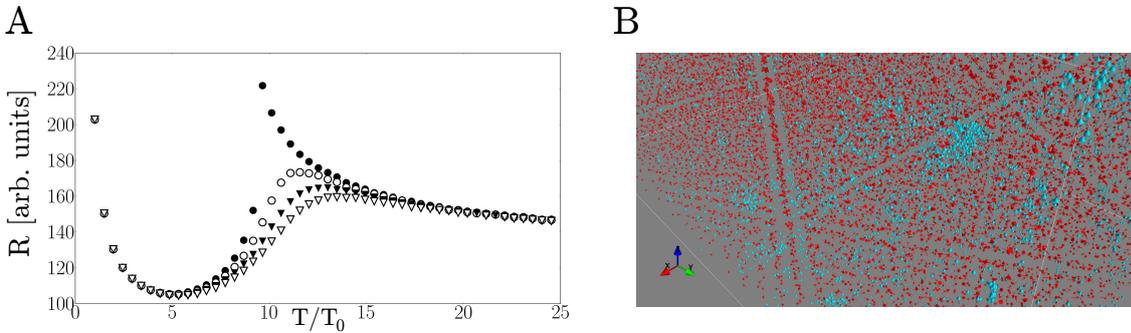


FIGURE 1 – A. Résistivité  $R$  en unité arbitraire en fonction de la température  $T$  pour différentes valeurs de champs magnétiques  $B$  : 0 (points noirs), 0.25 (points vides), 0.5 (triangles noirs), 0.75 (triangles vides). B. Visualisation 3D dans l'espace réel de la localisation des spins itinérants (flèches bleues) dans un réseau de spins d'Heisenberg (flèches rouges) à proximité de la température de transition.

1. A basse température, la résistivité augmente avec la diminution de la température  $T$ . L'origine de ce comportement provient d'un gel des électrons itinérants, conséquence de leurs interactions avec le réseau, et de leurs interactions mutuelles. Ce comportement est très similaire à la cristallisation de particules à basses températures.
2. Avant la température critique  $T_c$ , nous pouvons décrire le matériau comme un amas unique de spins parallèles comportant quelques défauts isolés (i.e. spins antiparallèles). Les électrons vont diffuser sur ces défauts donnant lieu à une décroissance de résistivité avec l'augmentation de la température.

3. A la température de transition, la résistivité présente un pique. Ce comportement est du au couplage des spins itinérants avec les fluctuations du réseau autour de la région critique. Nous avons déterminé que le pique de résistivité est du à la diffusion des électrons itinérants par des amas massifs de spins "down" qui apparaissent dans la région critique, mais également à la percolation du réseau à l'origine d'une localisation des spins itinérants dans les amas "up" du réseau, figure 1.B.

La seconde partie de mes recherches a consisté à comparer nos résultats de simulations avec des mesures expérimentales. Nous avons choisi pour ce travail un semiconducteur antiferromagnétique "MnTe", ayant la particularité de présenter une température de Néel à la température ambiante. Il résulte un bon accord entre nos résultats de simulation et les mesures expérimentales de plusieurs articles [2]. En parallèle, nous avons développé une nouvelle approche du problème en utilisant l'équation de Boltzmann basée sur la distribution des amas de spins autour de la transition comme centres diffuseurs [6]. Cette nouvelle approche venant confirmer nos précédents résultats et interprétations concernant l'origine du pique de résistivité à la température de transition.

La dernière partie de ma thèse s'est centrée sur l'étude du transport spins à travers un système antiferromagnétique frustré [3]. Dans un premier temps nous avons montré que dans le cas d'interactions d'Ising, la résistivité magnétique présente une discontinuité à la température de transition  $T_N$  (transition du premier ordre, confirmée dans un second article [5]). Cette discontinuité présente une transition des basses résistances vers les hautes résistances ou inversement en fonction de l'état dégénéré du système, conséquence de la frustration, figure 2.

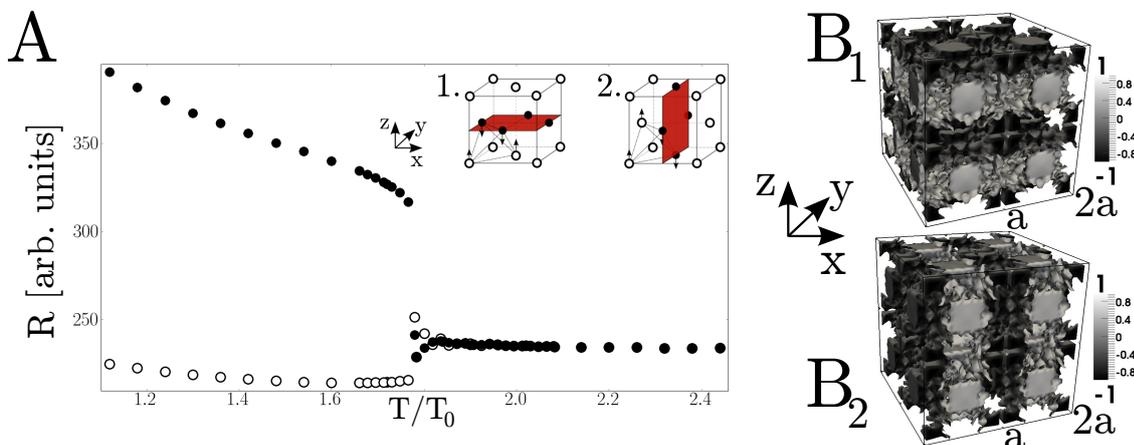


FIGURE 2 – A. Résistivité en fonction de la température  $T$  pour le premier (points blancs) et second état dégénéré (points noirs). L'encadré représente les deux états dégénérés avec les plans rouges repérant les plans ferromagnétiques pour chaque cellule. B. Paysage en énergie à  $T = 1$  dans une boîte de dimension  $2a \times 2a \times 2a$  (avec  $a$  le paramètre de maille) pour le premier et le second état dégénéré. Les échelles d'énergies pour chaque visualisation sont données en unités arbitraires.

Nous avons remarqué dans ce genre de système que les électrons itinérants se propagent le long des plans ferromagnétiques parallèles au champ électrique appliqué sur l'axe  $x$ . Dans le cas dégénéré 1, figure 2.A, inset 1, les électrons se propagent le long des plans de basses énergies, figure 2.B1, sans rencontrer de défaut magnétique. Ainsi, dans ce cas la résistivité est faible avant  $T_N$  et subit une transition des basses résistances vers les hautes résistances, figure 2.A. Cependant, dans le second état dégénéré, figure 2.A, inset 2, les électrons sont ralentis par les plans ferromagnétiques, et se propagent en rencontrant sur leur trajectoire une succession de plans de hautes énergies, figure 2.B2. Ce paysage magnétique va conduire la résistance à subir une transition des hautes résistances vers les basses résistances à la température  $T_N$ .

Un autre point intéressant dans le cas des réseaux antiferromagnétiques est la dépendance du mouvement des électrons avec la longueur d'interaction électrons-réseau, figure 3. En effet le trajet empreinté par les électrons dépend fortement de ce paramètre car il est fonction de la différence du nombre de spins "up" et "down" du réseau avec lequel l'électron interagit.

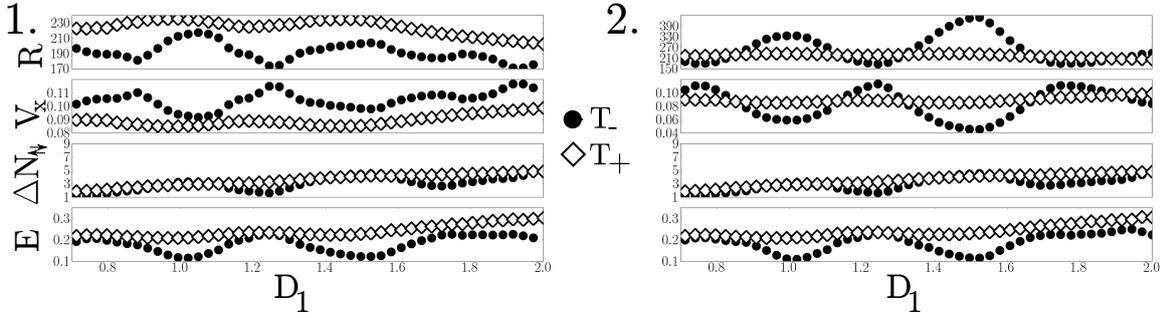


FIGURE 3 – Différentes grandeurs physiques fonction de  $D_1$  (longueur d'interaction) en unité de paramètre de maille  $a$  dans les cas des états 1 & 2. De haut en bas : résistivité, vitesse des électrons le long de l'axe  $x$ , différence entre nombre de spins "up" et "down" pris en compte par la longueur d'interaction électron-réseau, énergie des spins itinérants. Pour chaque figure, les points correspondent à  $T = T_N - \epsilon$ , les diamants à  $T = T_N + \epsilon$ .

### Références :

1. Y. Magnin, K. Akabli, H. T. Diep and Isao Harada, *Comp. Mat. Sci.* **49**, S204-S209 (2010).
2. Y. Magnin, H. T. Diep, *Phys. Rev. B* (2011), Submitted.
3. Y. Magnin, K. Akabli, H. T. Diep and Isao Harada, *Phys. Rev. B* **83**, 144406 (2011)
4. Y. Magnin, Hoang D.-T., Diep H. T, *Modern. Phys. Letters B. Volume : 25 Issue : 12-13 Pages : 1029-1040* (2011).
5. Danh-Tai Hoang, Y. Magnin and H. T. Diep, *Modern. Phys. Letters B. Volume : 25 Issue : 12-13 Pages : 937-945* (2011).
6. K. Akabli, Y. Magnin, H. T. Diep and Isao Harada, *Phys. Rev. B* **84**, 024428 (2010).
7. Y. Magnin, H. T. Diep. *Appl. Phys. Lett.* (2011), In preparation.
8. Y. Magnin, H. T. Diep, *J. Appl. Phys. Lett.* (2011), In preparation.
9. H. T. Diep, Y. Magnin, Danh-Tai Hoang, *Modern. Phys. Letters B.* (2011), Submitted.
10. P.-G. de Gennes and J. Friedel, *J. Phys. Chem. Solids* **4**, 71 (1958).
11. M. E. Fisher and J.S. Langer, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 665 (1968).
12. C. Haas, *Phys. Rev* **168**, 531 (1968).
13. T. Kasuya , *Prog. Theor. Phys.* **16**, 58 (1956), No. 1.
14. E. A. Turov, *Iza. Akad. Nauk. SSSR. Serb. Fiz.* **19**, 426 (1955).
15. G. Zarand, C. P. Moca and B. Janko, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 247202 (2005).
16. Mitsuo Kataoka, *Phys. Rev. B* **63**, 134435-1 (2001).