

Titre: Une approche théorique du magnéto-transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués de type III-V dopés manganèse
Title:

Auteur: Louis-François Arsenault
Author:

Date: 2006

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Arsenault, L.-F. (2006). Une approche théorique du magnéto-transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués de type III-V dopés manganèse [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/7701/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/7701/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Patrick Desjardins, & Arthur Yelon
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

UNE APPROCHE THÉORIQUE DU MAGNÉTO-TRANSPORT DANS LES
SEMI-CONDUCTEURS MAGNÉTIQUES DILUÉS DE TYPE III-V DOPÉS
MANGANÈSE

LOUIS-FRANÇOIS ARSENAULT
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE PHYSIQUE)
AVRIL 2006



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-17930-7

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-17930-7

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

UNE APPROCHE THÉORIQUE DU MAGNÉTO-TRANSPORT DANS LES
SEMI-CONDUCTEURS MAGNÉTIQUES DILUÉS DE TYPE III-V DOPÉS
MANGANÈSE

présenté par: ARSENAULT Louis-François

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. MÉNARD David, Ph.D., président

M. DESJARDINS Patrick, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. YELON Arthur, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. COCHRANE Robert, Ph.D., membre

à Armand et Normande

REMERCIEMENTS

Je voudrais en premier lieu remercier mes deux directeurs de recherche, Patrick Desjardins et Arthur Yelon. Je leur suis extrêmement reconnaissant du support qu'ils m'ont accordé, autant au baccalauriat qu'à la maîtrise et, surtout, d'avoir cru en moi. Je suis très touché par la marque de confiance qu'ils m'ont donné en acceptant que je travaille en physique théorique, bien qu'ils soient des expérimentateurs et, en plus, sur un sujet un peu extérieur à leurs subventions de recherche. Ils ont toujours été prompts à m'apporter l'aide nécessaire au bon déroulement de ma recherche, entre autres, en acceptant de subventionner des déplacements à Leeds en Angleterre et à Evanston en Illinois, ce dont peu d'étudiants à la maîtrise ont la chance de profiter.

Je voudrais aussi adresser mes remerciements les plus sincères au Dr. Bijan Movaghar qui m'a apporté une aide inestimable au cours de cette maîtrise. J'ai pu profiter de ses compétences impressionnantes en physique théorique et de son infinie gentillesse, en m'accueillant chez lui à Leeds et à Evanston, en m'offrant du temps précieux même si ses recherches principales étaient un peu différentes des miennes et en rendant mes séjours en Angleterre et au États-Unis très agréables. Bijan est un grand scientifique et j'espère bien avoir le bonheur de pouvoir collaborer avec lui dans le futur.

Merci au professeur Remo Masut qui, bien que n'étant pas directement un de mes superviseurs, m'a permis de le déranger à plusieurs occasions et m'a fait profiter de son expertise sur les semi-conducteurs. Merci aussi au professeur Alain Rochefort qui m'a accordé le privilège d'utiliser ses ordinateurs pour mes calculs numériques.

Pour sortir un peu du monde strictement académique, je voudrais exprimer ma

reconnaissance envers mes parents qui, bien qu’habitant plutôt loin de moi, ont toujours été là pour m’apporter l’aide dont j’avais besoin. Leur foi en la valeur de l’éducation m’a permis de traverser mes études universitaires en ne me souciant que de celles-ci. Merci à mes collègues et amis qui ont supporté ma présence plutôt bruyante. Plus particulièrement, merci à Annie Levesque qui a eu la gentillesse de lire et corriger ce long travail. Enfin, merci à mes amis non polytechniciens, qui me permettent de me changer les idées, les rares fois que je les vois.

Finalement, je voudrais remercier les professeurs David Ménard et Robert W. Cochrane pour avoir accepté d’être sur le jury de mon mémoire.

RÉSUMÉ

Nous présentons un modèle théorique de la résistivité et de l'effet Hall pour le semi-conducteur magnétique (DMS) $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ dans le régime métallique et soumis à un champ magnétique. Nous considérons que l'effet Hall anormal et le magnétisme proviennent, respectivement, de l'interaction spin-orbite intrinsèque du GaAs et de l'interaction antiferromagnétique entre les spins des porteurs et les spins localisés distribués de façon aléatoire. Le retournement de spin (*spin flip*) est également considéré. Le désordre s'intègre naturellement en utilisant l'approximation du potentiel cohérent (CPA) et les coefficients du transport (résistivité, magnéto-résistivité, coefficient et résistivité de Hall) sont calculés avec les formules de Kubo. Le modèle donne un relativement bon accord avec les données expérimentales disponibles sur le transport. En effet, la transition métal-isolant apparaissant sur les courbes de résistivité en fonction de la température pour les échantillons métalliques est qualitativement bien décrite par le modèle et le pourcentage de différence entre les valeurs à la température de transition magnétique $T = T_c$ et à $T = 0$ est reproduit en ajoutant une contribution constante provenant de la diffusion par des impuretés statiques. Excluant les résultats à très basse température, pour lesquels la courbe obtenue est convexe plutôt que concave, la magnéto-résistivité est elle aussi en bon accord qualitatif avec les résultats expérimentaux. D'autre part, la forme de la résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué (ρ_H), le troisième coefficient du transport pouvant être directement comparé avec l'expérience, suit bien les résultats pour les couches de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ où l'axe facile est perpendiculaire au plan. L'amplitude globale de ρ_H diminue avec la température considérée et sa dépendance avec B devient linéaire au-dessus de T_c , alors qu'en dessous, l'influence de la polarisation des porteurs est dominante. De plus, il n'est pas rare que le modèle soit satisfaisant au niveau quantitatif.

ABSTRACT

We present a theoretical model of the resistivity and the Hall effect for the diluted magnetic semiconductor (DMS) $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ in the metallic regime and subjected to an external magnetic field. We assume that the anomalous Hall effect and the magnetism come, respectively, from the intrinsic spin-orbit interaction of GaAs and from the antiferromagnetic interaction between the spins of the carriers and the randomly distributed localized spins. Spin flip is also considered. The disorder is integrated naturally by using the Coherent Potential Approximation (CPA) and the coefficients of transport (resistivity, magneto-resistivity, Hall coefficient and Hall resistivity) are calculated with the Kubo formulae. The model yields relatively good agreement with the available experimental data on transport. Indeed, the metal-insulator transition which appears in the curves of resistivity as a function of temperature for the metallic samples is qualitatively well described by the model, while the percentage difference between the values at the magnetic transition temperature $T = T_c$ and at $T = 0$ is reproduced by adding a constant contribution arising from scattering by static impurities. Excluding the results at very low temperature, for which the predicted curve is convex rather than concave, the magneto-resistivity is also in qualitative agreement with the experimental results. In addition, the form of the Hall resistivity as a function of applied magnetic field (ρ_H), the third transport coefficient which can be directly compared with the experiment, is in good agreement with the results for $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ with the easy axis perpendicular to the plan. The total amplitude of ρ_H decreases with temperature, and its dependence upon B becomes linear above T_c , whereas below, the influence of the carrier polarization is dominant. Moreover, the model is often satisfactory at the quantitative level.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vii
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xix
LISTE DES ANNEXES	xxiii
INTRODUCTION	1
0.1 Présentation générale	1
0.2 Le transport électrique et ses coefficients	9
0.2.1 Magnéto-résistivité	10
0.2.2 Effet Hall	11
0.2.3 Aspects phénoménologiques de l'effet Hall dans un conduc- teur magnétique	14
0.2.4 Aspects phénoménologiques de l'effet Hall dans un solide dé- sordonné	17
0.3 Définition du modèle simple considéré dans le mémoire	18
0.4 Organisation du mémoire	19

CHAPITRE 1	REVUE DE LA LITTÉRATURE	20
1.1	Transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués du point de vue expérimental	20
1.1.1	Résistivité et magnéto-résistivité	21
1.1.2	Coefficient(résistivité) de Hall	29
1.2	Transport dans les semi-conducteurs magnétiques diluées du point de vue théorique	34
1.2.1	Résistivité et magnéto-résistivité	34
1.2.2	Coefficient(résistivité) de Hall	38
CHAPITRE 2	MÉTHODOLOGIE	41
2.1	Contexte	41
2.2	Objectif	42
2.3	Approche	42
CHAPITRE 3	OUTILS THÉORIQUES DE BASE	44
3.1	Seconde quantification	44
3.2	Fonctions de Green	45
3.3	Systèmes désordonnés	50
3.4	Modèle des liaisons fortes (TB)	57
3.5	Formule quantique générale pour la conductivité	61
CHAPITRE 4	DÉVELOPPEMENT DU MODÈLE	65
4.1	Hamiltonien choisi	65
4.2	Parties réelles de la conductivité longitudinale et hors diagonale . .	70
4.3	Éléments du tenseur de conductivité pour un hypercube simple . .	72
4.3.1	Conductivité longitudinale	72
4.3.2	Conductivité de Hall	78
4.4	Discussion du signe devant la relation de dispersion	82

4.5	Signe du coefficient de Hall	83
4.6	Coefficient de Hall pour un réseau cubique simple	86
4.7	Approximation du potentiel cohérent pour le modèle considéré	88
4.7.1	Matrice t_m (opérateur de diffusion)	89
4.7.2	Moyenne thermique de l'opérateur $t_{ss}(S^z)$ (opérateur de diffusion)	95
4.7.2.1	Généralité sur la moyenne thermique d'un opérateur	96
4.7.2.2	Cas spécifique de $t_{ss}(S^z)$ (opérateur de diffusion)	96
4.7.3	Formulation de la relation auto-cohérente pour la <i>self-energy</i>	98
4.7.3.1	Cas spécial : $T = 0$	99
4.7.4	Algorithme du calcul pour $T \neq 0$	102
4.8	Niveaux d'une impureté à $T = 0$	103
4.8.1	Assymétrie des niveaux d'impuretés	107
4.8.2	Niveau d'intérêt pour une impureté dans le DMS	108
4.9	Récapitulatif	109
CHAPITRE 5 RÉSULTATS		110
5.1	Généralités	110
5.1.1	Constantes	110
5.1.2	Densité d'états (DOS)	113
5.1.2.1	Nombre d'états venant des impuretés	117
5.2	Transport à champ nul ; $B = 0$	119
5.2.1	Résistivité en fonction de la température	119
5.2.2	Résistivité en fonction de la densité de porteurs p	127
5.2.3	Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés x	132
5.3	Transport sous champ magnétique ($B \neq 0$)	137
5.3.1	Coefficients du transport en fonction de la température	138
5.3.2	Coefficients du transport en fonction du champ magnétique	144

5.3.2.1	Magnéto-résistivité	144
5.3.2.2	Résistivité de Hall	148
5.3.2.3	Magnéto-résistivité et résistivité de Hall à température nulle	153
CHAPITRE 6 DISCUSSION		156
6.1	Résistivité en fonction de la température	156
6.2	Magnéto-résistivité	158
6.3	Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique	159
6.4	Coefficient de Hall en fonction de la température	161
6.5	Récapitulatif	164
CONCLUSION		168
RÉFÉRENCES		170
ANNEXES		178

LISTE DES FIGURES

FIG. 1	Diagramme de phase montrant la relation entre les paramètres de croissance et les propriétés du GaMnAs par épitaxie par jet moléculaire d'après (Ohno, 1999).	3
FIG. 2	Paramètre de maille relaxé en fonction de la concentration en Mn x , déterminé à partir de la diffraction des rayons X d'après (Ohno, 1999).	4
FIG. 3	Mesures expérimentales de l'aimantation en fonction du champ magnétique externe. (a) Champ magnétique parallèle au plan pour des températures sélectionnées pour une couche de 150 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0.035$ (Matsukura <i>et al.</i> , 2002). Pour la courbe avec les cercles fermés, le champ est appliqué perpendiculairement. (b) Champ magnétique perpendiculaire au plan pour des températures sélectionnées pour une couche de 200 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0.053$ (Matsukura <i>et al.</i> , 2002). (c) Champ magnétique appliqué parallèlement et perpendiculairement au plan pour une température de 10 K (sous T_c) pour une couche de $\text{Ga}_{0.93}\text{Mn}_{0.07}\text{As}$ (Van Esch <i>et al.</i> (a), 1997). La figure insérée présente une vue agrandie pour l'échantillon à 4 K avec le champ selon la direction du plan.	5
FIG. 4	Résistivité de Hall ρ_H en fonction de l'induction magnétique pour un matériau magnétique	15

- FIG. 1.1 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction de la température. (a) Résistance pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec x entre 0,015 et 0,07 (Ohno, 1999). (b) Résistivité pour un échantillon $\text{Ga}_{0,94}\text{Mn}_{0,06}\text{As}$ soumis à différents recuits (Van Esch *et al.* (a), 1997). (c) Résistivité pour des échantillons $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,06$ (A) et $x = 0,07$ (B), avant et après recuit (Van Esch *et al.* (b), 1997). (d) Résistivité pour des échantillons recuits après hydrogénisation et pour l'échantillon référence (Thevenard *et al.*, 2005) 22
- FIG. 1.2 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction de la température lors de recuits. (a) Différents temps de recuits à 250°C pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,083 \pm 0,002$ (Potashnik *et al.*, 2001). (b) Aimantation et résistivité en fonction de la température pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,0597$ (cercles, comme crû; triangles, recuit) (Potashnik *et al.*, 2002). (c) Échantillon $\text{Ga}_{0,94}\text{Mn}_{0,06}\text{As}$ tel que crû et après recuit à 175°C (Edmonds *et al.*, 2002) 25
- FIG. 1.3 Dépendance en température de la résistivité pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec x entre 0,015 et 0,071 (Matsukura *et al.*, 1998). La figure insérée est une vue agrandie pour l'échantillon avec $x = 0,053$ autour de T_c avec la dépendance en champ magnétique. 26
- FIG. 1.4 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction du champ magnétique externe. (a) Échantillon de $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ avec la température comme paramètre (Matsukura *et al.*, 1998). La fraction de Mn est $x = 0,053$. (b) Échantillon de $\text{Ga}_{0,913}\text{Mn}_{0,087}\text{As}$ (Van Esch *et al.* (b), 1997). La figure insérée montre une vue agrandie autour de $B = 0$ pour $T = 10$ K. 27

FIG. 1.5	Magnéto-résistivité pour un échantillon $\text{Ga}_{0,947}\text{Mn}_{0,053}\text{As}$ - (Omiya <i>et al.</i> , 2000)	28
FIG. 1.6	Mesures expérimentales du coefficient de Hall en fonction de la température. (a) Échantillon de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,048$ et $T_c = 53$ K (Ruzmetov <i>et al.</i> , 2004). (b) Couche de $1,3\mu\text{m}$ de $\text{In}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,013$ d'après (Ohno <i>et al.</i> , 1992)	31
FIG. 1.7	Mesures expérimentales de la resistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué. (a) Couche de 200 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,053$ pour plusieurs températures (Matsukura <i>et al.</i> , 2002). (b) Couches $\text{Ga}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{As}/\text{GaAs}$ (compression, figure du haut) et $\text{Ga}_{0,957}\text{Mn}_{0,043}\text{As}/\text{InGaAs}$ (tension, figure du bas) pour plusieurs températures (Matsukura <i>et al.</i> , 2004)	32
FIG. 4.1	Structure de bande d'un solide 1D	82
FIG. 4.2	Forme de la fonction $h(\varepsilon)$ pour deux et trois dimensions	85
FIG. 5.1	Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.3W$ et $p = 0,1x$	114
FIG. 5.2	Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.4W$ et $p = 0,8x$	115
FIG. 5.3	Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.5W$ et $p = 0,3x$	116
FIG. 5.4	DOS pour $x = 0,053$, $J_{pd} = W$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$ et une température de $k_B T = 0$	118
FIG. 5.5	Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,015$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	121
FIG. 5.6	Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,035$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	122

FIG. 5.7	Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	123
FIG. 5.8	Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,07$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	124
FIG. 5.9	Résistivité en fonction de la densité de trous pour $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	128
FIG. 5.10	Résistivité en fonction de la densité de trous pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$. Le carré pointillé montre la valeur de p pour laquelle le système avec $J_{pd} = 0,3W$ subit une transition magnétique.	131
FIG. 5.11	Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	133
FIG. 5.12	Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	134
FIG. 5.13	Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour une densité de trous fixe $p = 0,01$ avec $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	136
FIG. 5.14	Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour une densité de trous fixe $p = 0,01$ avec $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$	137
FIG. 5.15	Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 1 \times 10^{-5} W$	139
FIG. 5.16	Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 1 \times 10^{-4} W$	140

FIG. 5.17	Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 3 \times 10^{-4} W$	141
FIG. 5.18	Résistivité en fonction de la température pour différents champs magnétiques pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$ et $E_M = 0$	143
FIG. 5.19	Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,3W$	145
FIG. 5.20	Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,35W$	146
FIG. 5.21	Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,4W$	147
FIG. 5.22	Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $J_{pd} = 0,5W$	148
FIG. 5.23	Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,3W$	150
FIG. 5.24	Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,35W$	151
FIG. 5.25	Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,4W$	152
FIG. 5.26	Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $J_{pd} = 0,4W$	153

FIG. 5.27	(a) Magnéto-résistivité et (b) résistivité de Hall; pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $k_B T = 0$	154
FIG. 6.1	Coefficient de Hall en fonction de la température pour les paramètres $x = 0,053$, $J_{pd} = 0,35W$, $E_M = 0$ et $p = 0,8x$. . .	163
FIG. 6.2	Coefficients du transport se comparant directement avec l'expérience pour $E_M = 0$, $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$	165

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

a :	Paramètre de maille
a_0 :	Paramètre de maille
$A(\zeta, \varepsilon)$:	Fonction spectrale
\mathbf{B} :	Induction magnétique
B :	Amplitude de l'induction magnétique
B^0 :	Amplitude de l'induction magnétique dans le vide
$c_{q,s}$:	Opérateur de destruction d'un état q de spin s
$c_{q,s}^\dagger$:	Opérateur de création d'un état q de spin s
$D(\mathbf{r}, E)$:	Densité d'états par unité de volume
d :	Nombre de dimensions
d :	Orbitale d
δ_{AB} :	Delta de Kronecker
$\delta(A - B)$:	Delta de Dirac
\mathbf{E} :	Champ électrique
E_H :	Champ de Hall
E :	Variable énergétique
E_f :	Énergie (niveau) de Fermi
E_{saut} :	Énergie décrivant le saut d'un porteur d'un site à l'autre
e :	Charge élémentaire
ε :	Variable énergétique
ε_c :	Bords de mobilité
ε_k :	Relation de dispersion
$f(A)$:	Fonction de Fermi-Dirac
g :	Facteur de Landé
g^* :	Facteur de Landé effectif

G :	Fonction de Green d'un Hamiltonien H
$G^{r,a}$:	Fonction de Green retardée ou avancée
G^0 :	Fonction de Green d'un Hamiltonien H_0
$\langle G(\varepsilon) \rangle$:	Valeur moyenne d'une fonction de Green ou fonction de Green d'un Hamiltonien H_{eff}
\mathbf{H} :	Champ magnétique
H :	Amplitude du champ magnétique
H :	Hamiltonien
H_0 :	Hamiltonien
H_{eff} :	Hamiltonien effectif
$\text{Im}\{A\}$:	Partie imaginaire de la quantité A
i :	Unité imaginaire
I :	Matrice identité
\mathbf{J} :	Densité de courant
$J_{m,n}$:	Constante d'échange pour des spins localisés
J_{pd} :	Constante d'échange entre des spins localisés et des spins mobiles
J_0, J_1, \dots :	Fonction de Bessel
$J_{h,i}$:	Opérateur moment cinétique des trous
k :	Vecteur d'onde
k_B :	Constante de Boltzmann
$\mathbf{K}(x)$:	Intégrale elliptique complète de première espèce
m :	Masse d'un électron
M :	Aimantation dans la direction d'application du champ magnétique
MR :	Magnéto-résistivité
μ_0 :	Perméabilité du vide
μ_B :	Magnéton de Bohr

N :	Facteur de désaimantation
N :	Nombre de sites
n :	Densité de porteurs (désigne habituellement les électrons)
n_{eff} :	Densité effective de porteurs
Ω :	Volume
p :	Densité de porteurs (désigne habituellement les trous)
p :	Orbitale p
P :	Hamiltonien
P :	Partie principale d'une fonction
$P(A)$:	Probabilité d'obtenir A
$\text{Re}\{A\}$:	Partie réelle de la quantité A
\mathbf{R} :	Vecteur position
\mathbf{r} :	Vecteur position
R_H :	Coefficient de Hall
R_0 :	Coefficient de Hall ordinaire
R_S :	Coefficient de Hall anormal
$\tilde{\rho}$:	Tenseur de résistivité
$\Delta\rho$:	Différence entre les résistivités pour un champ magnétique appliqué et pour champ nul
ρ_H :	Résistivité de Hall
$\hat{\rho}$:	Opérateur (matrice) densité
s :	Orbitale s
s :	Amplitude du spin d'un porteur
$\langle s^z \rangle$:	Polarisation moyenne des porteurs
\mathbf{S} :	Opérateur d'un spin localisé
S :	Amplitude d'un spin localisé

$\langle S^z \rangle$:	Valeur moyenne des spins localisés
$\tilde{\sigma}$:	Tenseur de conductivité
σ_{xy}^a :	Partie antisymétrique de l'élément hors diagonal du tenseur de conductivité
$\sigma_{ss'}$:	Vecteur des matrices de Pauli
Σ :	<i>Self-energy</i>
Tr :	Trace
T :	Temperature
T_c :	Temperature de Curie
T :	Matrice T (opérateur de diffusion)
t_n :	Matrice T pour un site (opérateur de diffusion)
t_{mn} :	Intégrale de saut décrivant le recouvrement des orbitales aux sites m et n
t :	Amplitude du chevauchement entre deux sites voisins
$\Theta(A - B)$:	Fonction de Heaviside
\hat{V} :	Opérateur vitesse
V :	Potentiel
v_n :	Potentiel sur un site
v :	Volume élémentaire
ω :	Fréquence angulaire
W :	Demi-largeur de bande
x :	Fraction d'impuretés
$\langle s, q $:	<i>bra</i> pour un état q de spin s
$ q, a\rangle$:	<i>ket</i> pour un état q de spin s
$[A, B]$:	Commutateur entre les opérateurs A et B
$\{A, B\}$:	Anticommutateur entre les opérateurs A et B

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	FORMULE DE KUBO POUR LA CONDUCTIVITÉ . . .	178
I.1	Expression générale pour un problème à N-corps	178
I.2	Cas d'un Hamiltonien à une particule	181
ANNEXE II	CONDUCTIVITÉ DANS L'APPROCHE TB	184
II.1	Élément non-diagonal	185
II.2	Élément diagonal (magnéto-résistivité)	197
ANNEXE III	MATRICE T_M	200

INTRODUCTION

0.1 Présentation générale

La compréhension des phénomènes impliquant le spin dans les matériaux est très importante, tant au niveau fondamental qu'appliqué. D'un point de vue technologique, la spintronique se présente comme une voix inédite pour, peut-être, remplacer l'électronique construite sur une approche semi-classique. Encore quelque peu hypothétique, elle se base sur la capacité d'effectuer le transport et le traitement de l'information en utilisant le spin d'un porteur mobile, un objet totalement quantique, au lieu de la charge. Pour ce faire, il faut bien sûr être en mesure d'avoir un contrôle direct sur le spin des porteurs mobiles ou, à tout le moins, de disposer d'un courant polarisé lors du processus de traitement de l'information. La volonté de maîtriser le spin force à considérer des milieux magnétiques, ce qui n'est pas le cas usuellement lorsqu'on cherche à définir un dispositif dont l'utilité ne se rapporte pas au stockage de l'information. La question suivante peut-être posée : Est-il nécessaire d'inventer quelque chose de totalement nouveau, sans correspondance avec ce qui est déjà connu ? Bien sûr, la réponse souhaitée est non, mais qu'en est-il ?

Les différences cristallines et physiques entre les matériaux magnétiques et semi-conducteurs usuels les rendent difficilement compatibles entre eux. Ainsi, la réalisation de jonctions entre ces deux types de matériaux n'est pas, *a priori*, la solution permettant d'obtenir des porteurs polarisés dans le semi-conducteur. Pouvons-nous faire autre chose ? Les dispositifs actuels utilisent le dopage de matériaux semi-conducteurs afin de contrôler les propriétés électroniques des porteurs de charge présents. Avec la spintronique, on cherche à contrôler à la fois le transport et le

spin, il serait donc des plus utile d'avoir accès à ceci à l'aide du seul dopage. Pour atteindre ce but, il faut incorporer des impuretés possédant des propriétés magnétiques qui doivent être conservées une fois intégrées à la matrice semi-conductrice. Loin d'être hypothétique, ces matériaux existent bel et bien, tels : InMnAs (Munekata *et al.*, 1989), GaMnAs (Ohno *et al.*, 1996), GaMnN (Pear-ton *et al.*, 2003), GaMnP (Pear-ton *et al.*, 2003), ZnMnTe (Ferrand *et al.*, 2001) etc. Notons que l'élément magnétique dans ces matériaux est habituellement le manganèse, puisque celui-ci possède un moment magnétique élevé. L'arséniure de gallium dopé manganèse est certainement le matériau le plus étudié jusqu'à main-tenant, ceci étant dû à la relativement haute température de Curie obtenue par Ohno *et al.* (Ohno, 1999) de 110 K au tout début. Edmonds *et al.* (Edmonds *et al.*, 2002) ont même réussi à obtenir $T_c = 140$ K. Du ferromagnétisme à température de la pièce a même été récemment rapporté dans le GaMnN (Pear-ton *et al.*, 2003). Les systèmes mentionnés ci-haut sont connus sous le nom de semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), en référence à la proportion de seulement quelques pourcent de l'élément magnétique. Il semble que dans ces matériaux (crus par épitaxie par jet moléculaire), les impuretés conservant leurs propriétés magnétiques se disposent de façon aléatoire dans la matrice en se substituant au cation. Les données expérimentales disponibles montrent que les DMS ont un diagramme de phase relativement complexe. La concentration en Mn et la température du sub-strat lors de la croissance détermine la nature de l'échantillon obtenue. La Figure 1 montre le comportement pour le GaMnAs.

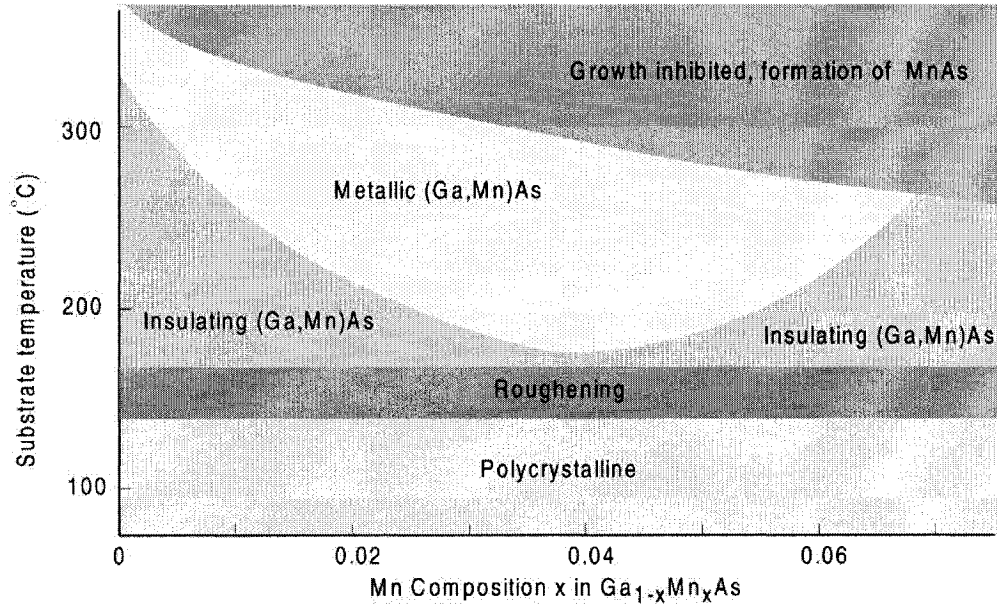


FIG. 1 Diagramme de phase montrant la relation entre les paramètres de croissance et les propriétés du GaMnAs par épitaxie par jet moléculaire d'après (Ohno, 1999).

Pour être intéressant, un DMS doit se situer dans la région du milieu de la Figure 1, soit du GaMnAs isolant ou métallique. En effet, la partie du haut nous laisse avec du GaAs contenant des îlots MnAs et l'état polycristallin n'est pas très recommandable puisque les frontières, qui sont des défauts, sont certainement dommageables pour la cohérence des porteurs polarisés.

Il est vérifié expérimentalement que les DMS de type III-V conservent la structure zinc-blende et que l'évolution du paramètre de maille suit la règle de Vegard ($a_{\text{III-Mn-V}} = (1-x)a_{\text{III-V}} + xa_{\text{Mn-V}}$) comme le montre la Figure 2. Nous voyons donc que du côté de la structure cristalline, le GaMnAs est plutôt simple, ne présentant pas de changement de type de maille par rapport au GaAs, seulement une modification du paramètre de maille.

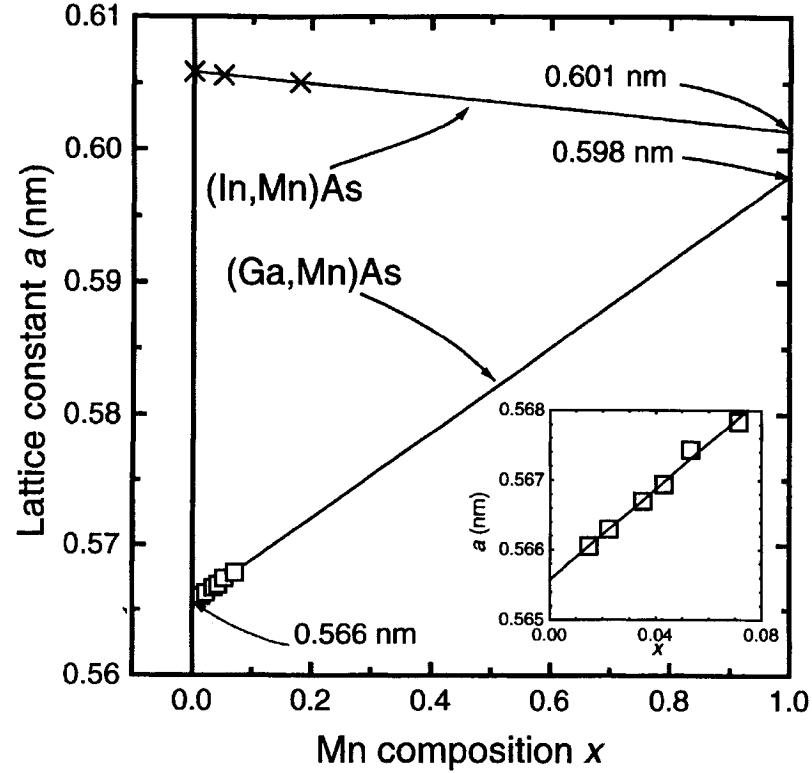


FIG. 2 Paramètre de maille relaxé en fonction de la concentration en Mn x , déterminé à partir de la diffraction des rayons X d'après (Ohno, 1999).

La nature ferromagnétique de l'alliage est démontrée par les courbes d'aimantation. Dans un matériau magnétique, il existe des domaines magnétiques qui sont la cause des cycles d'hystérésis et l'existence d'anisotropies crée des axes faciles et difficiles d'aimantation. La Figure 3 présente des courbes d'aimantation pour des couches en compression et montre bien que l'axe facile est dans le plan. Liu et al. (Liu *et al.*, 2003) obtiennent le même genre de résultats.

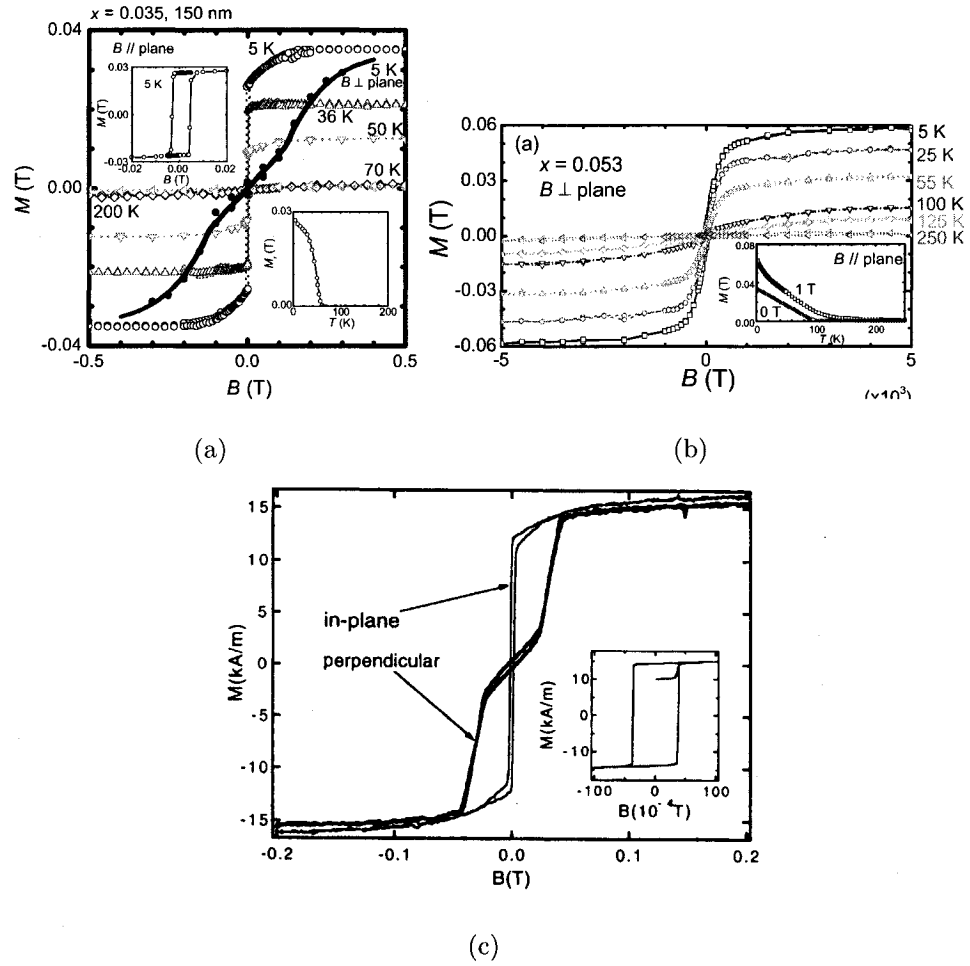


FIG. 3 Mesures expérimentales de l'aimantation en fonction du champ magnétique externe. (a) Champ magnétique parallèle au plan pour des températures sélectionnées pour une couche de 150 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0.035$ (Matsukura *et al.*, 2002). Pour la courbe avec les cercles fermés, le champ est appliqué perpendiculairement. (b) Champ magnétique perpendiculaire au plan pour des températures sélectionnées pour une couche de 200 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0.053$ (Matsukura *et al.*, 2002). (c) Champ magnétique appliqué parallèlement et perpendiculairement au plan pour une température de 10 K (sous T_c) pour une couche de $\text{Ga}_{0.93}\text{Mn}_{0.07}\text{As}$ (Van Esch *et al.* (a), 1997). La figure insérée présente une vue agrandie pour l'échantillon à 4 K avec le champ selon la direction du plan.

L'aimantation selon l'axe facile montre un cycle d'hystérésis alors que celle selon l'axe difficile n'en montre pas vraiment et la montée vers la saturation se fait de façon beaucoup plus graduelle.

Les informations précédentes sur le GaMnAs nous permettent d'esquisser en partie le comportement microscopique de ses constituants. Commençons par comprendre comment un atome de manganèse peut prendre la place d'un atome de gallium. Dans le GaAs pur, les atomes de gallium et d'arsenic, ayant respectivement une valence $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p$ et $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^3$, s'hybrident pour créer des liens tétraédriques sp^3 , formant ainsi une structure cristalline de type zinc-blende. Comme l'ajout de Mn ne change pas la structure, lorsqu'un manganèse $[\text{Ar}]3d^54s^2$ se fixe sur un site Ga, il doit se modifier pour être en mesure de former des liens sp^3 avec l'arsenic. Il manque 3 électrons au Mn pour compléter le lien avec l'As le plus proche. En premier lieu, l'arsenic va donner un électron p , ce qui permet au Mn de devenir $[\text{Ar}]3d^54s^24p$. L'arsenic a maintenant la structure $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^2$ et peut s'hybrider sp^3 en transférant un électron s au niveau p . Par contre, pour faire de même, le manganèse a encore besoin d'un nouvel électron p . L'énergie des électrons $4p$ se présente comme une bande plutôt qu'un niveau unique. Le manganèse va donc «piger» son autre électron dans celle-ci pour devenir $[\text{Ar}]3d^54s^24p^2$ et l'hybridation sp^3 peut avoir lieu.

Deux points importants ressortent de ce processus :

- a) Les orbitales d conservent leur caractère localisé et les fonctions d'ondes les décrivant n'interagissent que faiblement avec celles se situant autour d'un autre site dans l'hypothèse où les impuretés se distribuent de façon aléatoire, c'est-à-dire sans propension à la formation d'agrégats. Comme il y a 5 électrons d par ion, un spin local d'une valeur de $5/2$ est créé à chaque site où un manganèse remplace un gallium.

- b) L'utilisation d'un électron d'une bande laisse un trou en orbite autour de l'ion Mn, qui est maintenant chargé. Le trou va tenter d'écranter le Mn et ainsi, il y aura une interaction de charge et de spin entre le trou et le Mn. Lorsque la concentration de dopants devient élevée, les trous s'hybrident, devenant délocalisés et propageant ainsi l'interaction magnétique entre les ions.

Si, comme discuté ci-haut, les électrons d n'interagissent pas vraiment avec ceux des autres sites, l'échange direct entre des spins localisés ne peut être l'explication de l'existence du ferromagnétisme. Une théorie satisfaisante doit être en mesure de décrire un trou de caractère p se déplaçant dans le cristal et interagissant avec des spins localisés au moyen d'une interaction d'échange. Comme la bande est de type p , ce qui induit l'existence de l'interaction spin-orbite, le trou de spin $1/2$ se couple avec le moment cinétique orbital. Bien qu'ayant une certaine ressemblance, nous ne sommes pas en présence de l'effet Kondo. Si tel était le cas, tous les porteurs, même ceux se situant profondément dans la bande de valence sentiraient l'interaction magnétique. Dans les DMS, seulement les électrons de la bande $4p$ ayant des énergies près du niveau des impuretés vont pouvoir sauter sur des impuretés et ainsi créer des trous qui vont interagir magnétiquement avec le Mn. Bien que le réseau soit ordonné géométriquement parlant, les atomes de Mn sont répartis aléatoirement sur les sites ; nous sommes donc en présence de désordre et le traitement théorique doit en tenir compte. Bien que chaque Mn prenant place sur un site Ga fournisse un trou, la densité effective de trous mesurée expérimentalement p est beaucoup plus faible que celle des impuretés N_{Mn} (voir par exemple (Ohno, 1999)). Si cette densité effective est égale à la vraie densité de porteurs mobiles, c'est qu'il se produit ainsi une forme de compensation dans les DMS. L'explication théorique du magnétisme basée sur l'effet Rudermann-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY), une interaction entre les moments locaux qui change de signe avec la distance entre ceux-ci, devrait être rejetée d'emblée. En effet, ce phénomène est prédit pour un gaz électronique auquel on ajoute quelques moments localisés agissant comme une

perturbation du système, ce qui n'est pas le cas ici. Spécifions aussi que l'interaction entre les trous et les spins localisés est, selon l'expérience, antiferromagnétique et que les phénomènes magnétiques sont observés pour une concentration entre 1% et 7% (Matsukura *et al.*, 2002). Enfin, l'affirmation que le magnétisme provient d'une médiation des porteurs de charge plutôt que d'un échange direct entre les spins localisés est démontrée par des expériences d'effet de champ : la variation de la concentration de porteurs à l'aide d'une grille modifie la température de Curie (Matsukura *et al.*, 2002).

Le travail présenté ici consiste à étudier un modèle dit minimal selon la littérature scientifique, c'est-à-dire avec peu de paramètres. La première question qui vient en tête est : que doit prédire un modèle minimal ? La majorité du travail théorique disponible repose sur la tentative de prédire l'aimantation et surtout, la température de Curie, la raison étant clairement le désir d'obtenir un matériau présentant des propriétés magnétiques à température de la pièce pour permettre la fabrication de dispositifs utilisables. Par contre, il est justifiable de se demander si la prédiction de telles propriétés constitue un modèle minimal. En effet, si on cherche à créer un dispositif basé sur l'aimantation, l'utilisation de couches minces magnétiques usuelles est probablement plus intéressante, étant donné que l'amplitude de l'aimantation sera plus élevée que dans le cas d'un semi-conducteur magnétique. L'intérêt des DMS réside dans la polarisation des porteurs de charge et particulièrement dans la compatibilité avec les autres semi-conducteurs pour l'intégration en hétérostructure fonctionnant sur le mode d'injection de porteurs polarisés. Dans cette perspective, la compréhension des propriétés de transport est de toute première importance pour le domaine. C'est pourquoi nous voulons vérifier ici si, à partir d'un même modèle simple, nous pouvons atteindre une compréhension qualitative de la dynamique des excitations électroniques dans la phase métallique, c'est-à-dire où les états électroniques sont étendus. Nous pourrions ainsi vérifier si les effets de spin

sont dominants dans le transport ou si d'autres mécanismes doivent impérativement être présents pour fournir une explication microscopique cohérente. Nous nous proposons ainsi de présenter une étude systématique du transport basée sur le formalisme quantique de Kubo (Kubo, 1956; Kubo, 1957), qui donne la réponse linéaire lorsqu'un champ électrique est appliqué à un solide.

0.2 Le transport électrique et ses coefficients

Dans cette section, les coefficients du transport sont définis et nous discutons de façon générale des aspects du transport pour des conducteurs magnétiques et des matériaux désordonnés, étant donné que les DMS dans la phase métallique présentent ces caractéristiques. Ceci permet de se concentrer, par la suite, strictement sur les DMS.

Si \mathbf{E} et \mathbf{H} représentent respectivement des champs électrique et magnétique externes appliqués à un solide et que l'intensité de ces champs n'est pas trop élevée, la densité de courant engendrée est proportionnelle au champ électrique. Cette situation, appelée *loi d'Ohm*, s'exprime mathématiquement comme

$$\mathbf{J} = \tilde{\sigma} \mathbf{E}, \quad (1)$$

où $\tilde{\sigma}$ est appelé tenseur de conductivité et est donné par

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

À l'inverse, nous définissons le tenseur de résistivité $\tilde{\rho} = \tilde{\sigma}^{-1}$, ce qui permet d'écrire

$$\mathbf{E} = \tilde{\rho} \mathbf{J}, \quad (3)$$

avec

$$\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & \rho_{xz} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} & \rho_{yz} \\ \rho_{zx} & \rho_{zy} & \rho_{zz} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Divers coefficients peuvent être définis lorsque nous sommes dans une situation où $\mathbf{H} \neq 0$. Dans ce mémoire, seuls les deux plus communs sont considérés en détail : la magnéto-résistivité et l'effet Hall. Notons aussi qu'une induction magnétique externe B^0 peut-être définie à partir du champ externe $B^0 \equiv \mu_0 H$. Au cours de ce mémoire, lorsque nous faisons référence au champ magnétique externe, nous utilisons habituellement B^0 même si le vrai champ est H .

0.2.1 Magnéto-résistivité

Imaginons qu'une source externe induise un courant dans un conducteur et qu'au même moment, un champ magnétique soit appliqué. Dans cette situation, nous définissons la magnéto-résistivité comme

$$\frac{\rho(B^0) - \rho(B^0 = 0)}{\rho(B^0 = 0)} \equiv \frac{\Delta\rho}{\rho(B^0 = 0)}. \quad (5)$$

Par convention, le courant induit par la source externe est défini comme étant dans la direction x .

Selon Hurd (Hurd, 1972), il est bon de distinguer deux cas expérimentaux :

- a) \mathbf{H} parallèle à l'axe x . L'équation (5) définit la *magnéto-résistivité longitudinale*
- b) \mathbf{H} parallèle à l'axe z . L'équation (5) définit la *magnéto-résistivité transverse*

Seule la magnéto-résistivité transverse est traitée dans ce travail. Nous sommes seulement intéressé à un champ en z puisque, comme nous le verrons dans la sous-section suivante, il s'agit de la direction qu'il faut choisir pour étudier l'effet Hall. Dans ce cas, l'expression de la magnéto-résistivité s'écrit

$$\frac{\Delta\rho}{\rho(B^0=0)} = \frac{\rho_{xx}(B^0) - \rho_{xx}(B^0=0)}{\rho_{xx}(B^0=0)} \equiv MR. \quad (6)$$

0.2.2 Effet Hall

Si un courant dans la direction x existe et que nous appliquons un champ magnétique dans la direction z soit $\mathbf{H} = H_z \hat{z}$, une partie du courant est déviée dans la direction y , ce qui cause une accumulation de charges sur les faces perpendiculaires à la direction y de l'échantillon. Ceci créera un champ électrique E_y , appelé aussi champ de Hall E_H s'opposant au courant en y jusqu'à l'obtention du régime stationnaire, pour lequel $J_y = 0$.

Expérimentalement, nous connaissons le courant J_x ainsi que l'induction magnétique B_z^0 , appliqués par des sources et nous mesurons le champ de Hall. Le coefficient de Hall est défini comme

$$R_H \equiv \frac{E_H}{J_x B_z^0}. \quad (7)$$

L'intérêt de ce coefficient est considérable. En effet, dans le cas d'un solide cristallin non-magnétique, si le modèle des électrons presque libres est applicable, R_H est inversement proportionnel à la densité de porteurs mobiles et son signe indique la

nature de ceux-ci (électrons ou trous) ($R_H = \frac{1}{\pm en}$). Dans un matériau magnétique cristallin, comme nous le verrons plus loin, R_H est composé de deux termes, l'un proportionnel à l'induction magnétique ressentie dans le matériau et l'autre à l'aimantation. De plus, R_H peut servir à déterminer les types de mécanismes de diffusion présents dans un matériau donné.

Regardons de plus près R_H . Le champ électrique E_y s'écrit, dans le cas où la loi d'Ohm est appropriée (champ faible), comme

$$E_y = \rho_{yx}J_x + \rho_{yy}J_y, \quad (8)$$

où ρ_{ij} sont les éléments du tenseur de résistivité. Comme aucun courant n'est appliqué en z , $J_z = 0$. Comme discuté plus haut, dans les conditions expérimentales, $J_y = 0$ et ainsi

$$\rho_{yx} = \frac{E_y}{J_x}. \quad (9)$$

Avec (9), le coefficient de Hall devient

$$R_H = \frac{E_H}{J_x B_z^0} = \frac{1}{B_z^0} \rho_{yx}(B_z^0). \quad (10)$$

Cette définition n'est pas la meilleure possible. En effet, théoriquement, c'est plutôt la conductivité qui est accessible. Dans le cas discuté ici, $J_x \neq 0$, $J_y = J_z = 0$, $E_z = 0$ et $B_x = B_y = 0$. Nous pouvons ainsi écrire

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Le tenseur de résistivité est donné par l'inverse de la conductivité $\tilde{\sigma}^{-1}$:

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\sigma_{zz}[\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}]} \begin{pmatrix} \sigma_{yy}\sigma_{zz} & -\sigma_{xy}\sigma_{zz} & 0 \\ -\sigma_{yx}\sigma_{zz} & \sigma_{xx}\sigma_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Si le système est isotrope dans le plan xy , $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Nous avons donc

$$\rho_{yx} = \frac{-\sigma_{yx}}{\sigma_{xx}^2 - \sigma_{xy}\sigma_{yx}}. \quad (13)$$

En utilisant cette égalité, nous pouvons réécrire l'équation (10) :

$$R_H = \frac{1}{B_z^0} \left[\frac{-\sigma_{yx}(B_z^0)}{\sigma_{xx}^2(B_z^0) - \sigma_{xy}(B_z^0)\sigma_{yx}(B_z^0)} \right]. \quad (14)$$

La conductivité longitudinale est affectée par le champ magnétique, mais pas par sa direction ($\pm\hat{z}$) et il est tout à fait raisonnable de supposer que les éléments non diagonaux du tenseur de conductivité sont beaucoup plus faibles que les diagonaux, étant donné qu'il n'y a pas d'application directe d'une source de tension en y . Considérant ceci et la symétrie des éléments du tenseur de conductivité, nous obtenons, pour le coefficient de Hall

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{-\sigma_{yx}(B_z^0)}{B_z^0 \sigma_{xx}^2(B_z^0)} \\ &= \frac{\sigma_{xy}(B_z^0)}{B_z^0 \sigma_{xx}^2(B_z^0)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Il est important, à ce stade ci, d'apporter une précision quant au tenseur de conductivité. Les équations présentées précédemment se basent sur des quantités directement mesurables expérimentalement, soit des nombres réels. Par contre, comme nous allons le voir plus loin, nous définissons théoriquement le tenseur de conductivité comme étant complexe, car nous utilisons une forme complexe pour les champs

sinusoïdaux et prenons la partie réelle pour le calcul de R_H . Ainsi, nous devrions plutôt écrire (15) comme

$$R_H = \frac{\text{Re}\{\sigma_{xy}(B_z^0)\}}{B_z^0 [\text{Re}\{\sigma_{xx}(B_z^0)\}]^2}. \quad (16)$$

0.2.3 Aspects phénoménologiques de l'effet Hall dans un conducteur magnétique

Lorsqu'une mesure d'effet Hall est effectuée sur un échantillon présentant une aimantation non nulle, le résultat obtenu présente une dépendance au champ magnétique différente de celle d'un matériau non magnétique dont le coefficient de Hall R_H est une constante et ainsi, la résistivité de Hall $\rho_H \equiv \rho_{yx} = R_H B_z^0$ présente une dépendance linéaire avec le champ. Cette différence est une conséquence des interactions de spin. La Figure 4 présente schématiquement le comportement de la résistivité de Hall en fonction de l'induction magnétique B .

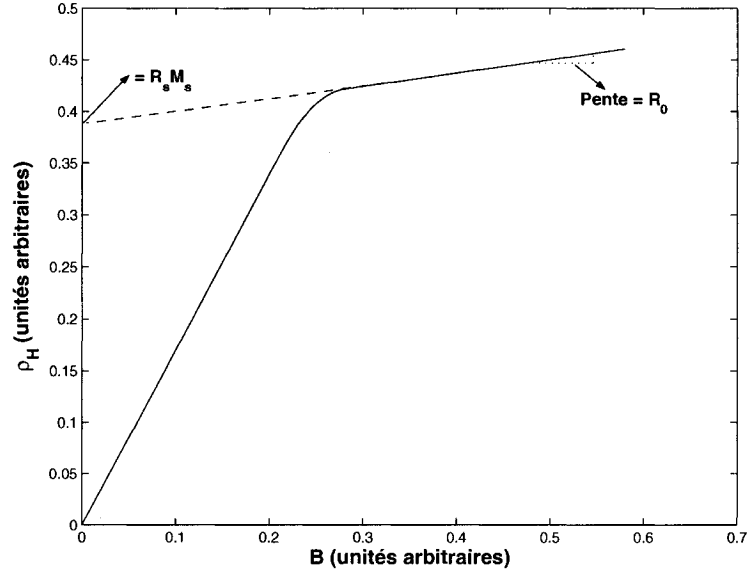


FIG. 4 Résistivité de Hall ρ_H en fonction de l'induction magnétique pour un matériau magnétique

Il y a initialement une augmentation rapide et linéaire de ρ_H avec B , suivie en général par une deuxième portion linéaire de pente plus faible. Il a été démontré que le comportement décrit sur la Figure 4 peut être décomposé en deux contributions additives (Smith et Sears, 1929; Pugh, 1930; Pugh et Lippert, 1932). De façon empirique, nous pouvons bien représenter les points expérimentaux par l'expression suivante

$$\rho_H = R_0 B + R_S M, \quad (17)$$

où R_0 et R_S sont respectivement les coefficients de Hall ordinaire et anormal, B l'induction magnétique totale et M l'aimantation du solide dans la direction d'application du champ. L'induction magnétique est égale à $B = \mu_0 [H + (1 - N)M]$, où N est le facteur de désaimantation. Pour un champ appliqué perpendiculairement à une couche mince, $N = 1$ et $B = B_z^0$ en ce qui nous concerne. Lorsque le champ devient tel que l'aimantation atteint la saturation, la dérivée de la résistivité

de Hall par rapport à l'induction magnétique est égale à R_0 . Nous pouvons définir une densité effective de porteurs de telle sorte que $R_0 \equiv \frac{1}{\pm en_{eff}}$. Il n'est pas clair que n_{eff} soit nécessairement égal à n ou p , la vraie densité de porteurs. Seule une comparaison avec d'autres méthodes de mesure peut permettre d'apporter une réponse à cette interrogation pour un matériau donné. Dans l'état ferromagnétique ou antiferromagnétique, les données expérimentales montrent que R_S dépend fortement de la température. Notons aussi que le comportement décrit précédemment n'est pas seulement réservé aux matériaux ferromagnétiques, mais peut être présent dans tout solide dans lequel il y a des moments magnétiques localisés de forte amplitude. L'interaction spin-orbite, la diffusion par les impuretés, les phonons et les magnons devraient être les ingrédients nécessaires au développement d'une compréhension microscopique de l'équation (17).

Une des explications avancées pour expliquer cette forme particulière du coefficient R_S a été donnée par Smit (Smit, 1958) et est appelée diffusion asymétrique (*Skew scattering*). Elle est caractérisée par une différence entre les probabilités d'être diffusée à gauche ou à droite pour une charge qui découle des deux effets spin-orbites possibles, soient l'interaction spin-orbite intrinsèque, qui implique le couplage entre le spin et le moment angulaire orbital d'une particule en mouvement dans un champ électrique, et l'interaction spin-autre-orbite (McGuire *et al.*, 1979), qui couple le spin et le moment angulaire orbital de deux particules en mouvement l'une par rapport à l'autre. Une autre cause, avancée par Berger (Berger, 1970), se nomme saut latéral (*side-jump*) et représente un déplacement latéral de la trajectoire de l'électron après un événement de collision. Cette dernière est remise en cause (Movaghar et Cochrane (a), 1991), car ce processus n'est pas présent dans le traitement relativiste de la diffusion effectué par Mott. Par contre, les mêmes auteurs (Movaghar et Cochrane (b), 1991) obtiennent, avec une autre approche, un terme ayant la forme du saut latéral sans utiliser les arguments de Berger, mais

seulement l'énergie magnétique. De plus, récemment, Crépieux et Bruno (Crépieux et Bruno, 2001) ont obtenu, à l'aide d'une approche totalement relativiste du transport, un mécanisme du type de celui de Berger. Ce ne sont que quelques exemples de la controverse toujours présente à propos de l'explication microscopique de l'effet Hall anormal.

Notons que le lecteur intéressé à un compte rendu plus complet pour cette sous-section et la suivante est invité à consulter (Hurd, 1972) et (Berger et Bergmann, 1979).

0.2.4 Aspects phénoménologiques de l'effet Hall dans un solide désordonné

Dans un solide cristallin, les porteurs sont décrits par l'approximation de la masse effective et peuvent être vus comme des fonctions de Bloch avec une charge et une masse effective bien déterminées, c'est-à-dire soit des électrons, soit des trous. Par contre, le cas des matériaux désordonnés est différent, car trois situations contraires à la théorie de la structure de bande peuvent exister (Friedman, 1985) : (1) le transport s'effectue dans des bandes d'énergie très étroites, c'est-à-dire avec une largeur de bande $< k_B T$, (2) le transport prend place via le saut de porteurs entre des états localisés dans des milieux ordonnés et désordonnés, (3) le transport est caractérisé par des états étendus n'ayant pas du tout la forme de fonctions de Bloch. Étant donné ces mécanismes, le coefficient de Hall ne renseigne pas nécessairement sur la nature des porteurs, le signe de R_H n'étant pas seulement une fonction de la position du niveau de Fermi. Même si les DMS ne sont pas amorphes, ils ont quand même une certaine dose de désordre, ce qui nous oblige à être attentifs à ces faits lorsque nous les étudions.

0.3 Définition du modèle simple considéré dans le mémoire

Prenons quelques lignes pour expliciter de façon claire et imagée le modèle que nous étudions dans ce travail et qui est construit pour répondre à ce qui a été discuté dans la section 0.1. Imaginons premièrement un ensemble de sites répartis de façon tridimensionnelle. Par site, nous entendons un atome à sa position d'équilibre. Nous supposons qu'il existe deux types de sites possibles, l'un décrit par un potentiel constant et l'autre décrit par un spin localisé se traduisant par un potentiel contenant un degré de liberté interne. Dans cet espace, nous considérons des porteurs (trous) de type p (l'effet spin-orbite provenant du moment angulaire orbital des charges est considéré) sans interaction. Nous supposons qu'il existe une probabilité unique pour qu'un porteur saute d'un site à l'autre, peu importe la nature des deux sites en jeu. Ainsi, la seule corrélation présente est indirecte. Lorsqu'un trou rencontre un site magnétique, le potentiel atomique (spin localisé) peut être modifié par l'interaction avec le trou et ainsi, lorsqu'un autre porteur atteint ce même site, le potentiel sera différent. Il existe donc une corrélation indirecte entre les trous causée par le degré de liberté interne du potentiel. Nous pouvons aussi analyser la situation du point de vue du spin localisé (potentiel magnétique). Dans ce cas, nous suivons un même trou au cours de son périple de site en site. Celui-ci, modifiant les potentiels magnétiques, nous pouvons conclure à la présence d'une corrélation indirecte entre les potentiels magnétiques. Ceux-ci étant créés par des spins localisés, nous voyons qu'il peut exister un alignement magnétique et ainsi une aimantation non nulle. Ce modèle est ce que nous considérons comme étant le plus simple possible où les seuls paramètres à spécifier sont la probabilité qu'un porteur transfère d'un site à l'autre ainsi que les deux différents potentiels atomiques qui agissent sur un porteur lorsque celui-ci est campé sur un de ceux-ci.

0.4 Organisation du mémoire

Au Chapitre 1, une revue de la littérature, portant sur les résultats de transport dans les DMS, est présentée. Une rapide méthodologie est ensuite exprimée au Chapitre 2. Par la suite, au Chapitre 3, les notions théoriques de bases, nécessaires pour comprendre le modèle que nous développons sont présentées. Le modèle est développé de façon complète au Chapitre 4. Les résultats des calculs sont, quant à eux, montrés au Chapitre 5. Finalement, ceux-ci sont discutés et comparés avec les données expérimentales au Chapitre 6.

CHAPITRE 1

REVUE DE LA LITTÉRATURE

Puisque ce mémoire traite exclusivement des propriétés DC de transport des semi-conducteurs magnétiques dilués selon une approche théorique, nous nous limitons à aborder cet aspect dans la revue de la littérature, une courte introduction aux DMS ayant été présentée dans l'introduction. Nous commençons d'abord par les propriétés du transport tel que données par l'expérience suivi par une perspective théorique.

1.1 Transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués du point de vue expérimental

Hideo Ohno est un des pionniers dans la fabrication et la réalisation de semi-conducteurs magnétiques dilués basés sur le dopage de matériaux III-V avec du manganèse. Ses collaborateurs et lui ont réalisé les premier DMS avec des semi-conducteurs III-V : InMnAs (Munekata *et al.*, 1989) et GaMnAs (Ohno *et al.*, 1996). Les premiers résultats de transport, pour le système InMnAs, ont été publiés en 1991 et 1992 dans (Ohno *et al.*, 1991) et (Ohno *et al.*, 1992). Dans (Ohno, 1999), Ohno résume les résultats expérimentaux obtenus par ses collaborateurs et lui au cours des années 90. Suite à ces réussites, le nombre de travaux publiés sur les DMS et leurs propriétés de transport s'est multiplié. Nous allons séparer la discussion sur la littérature en fonction de la résistivité longitudinale et du coefficient (résistivité) de Hall et présenter des résultats typiques.

1.1.1 Résistivité et magnéto-résistivité

La resistivité en fonction de la température est une mesure très importante dans l'étude d'un matériau. En effet, celle-ci permet de connaître les régimes présents dans le système, étant donné qu'un objet solide peut-être métallique ou isolant. Le premier état présente une variation de la résistivité en fonction de la température qui est positive ($\frac{\partial \rho}{\partial T} > 0$), alors que le deuxième a le comportement inverse, i.e ($\frac{\partial \rho}{\partial T} < 0$). Le passage pour un échantillon entre les états métallique et isolant autour d'une température donnée est appelé «transition métal-isolant».

Les résultats expérimentaux pour les DMS montrent clairement qu'il est possible, sous certaines conditions, d'observer cette transition. La Figure 1.1 montre quatre exemples, tirés de la littérature, de ce comportement. La Figure 1.1(a) contient des données pour plusieurs fractions d'impuretés, alors que les trois autres explicitent ce qui arrive lorsque des recuits sont effectués sur des échantillons *purs* (i.e sans autre dopants que le Mn) (Figure 1.1(b) et Figure 1.1(c)) et sur des échantillons hydrogénés (Figure 1.1(d)).

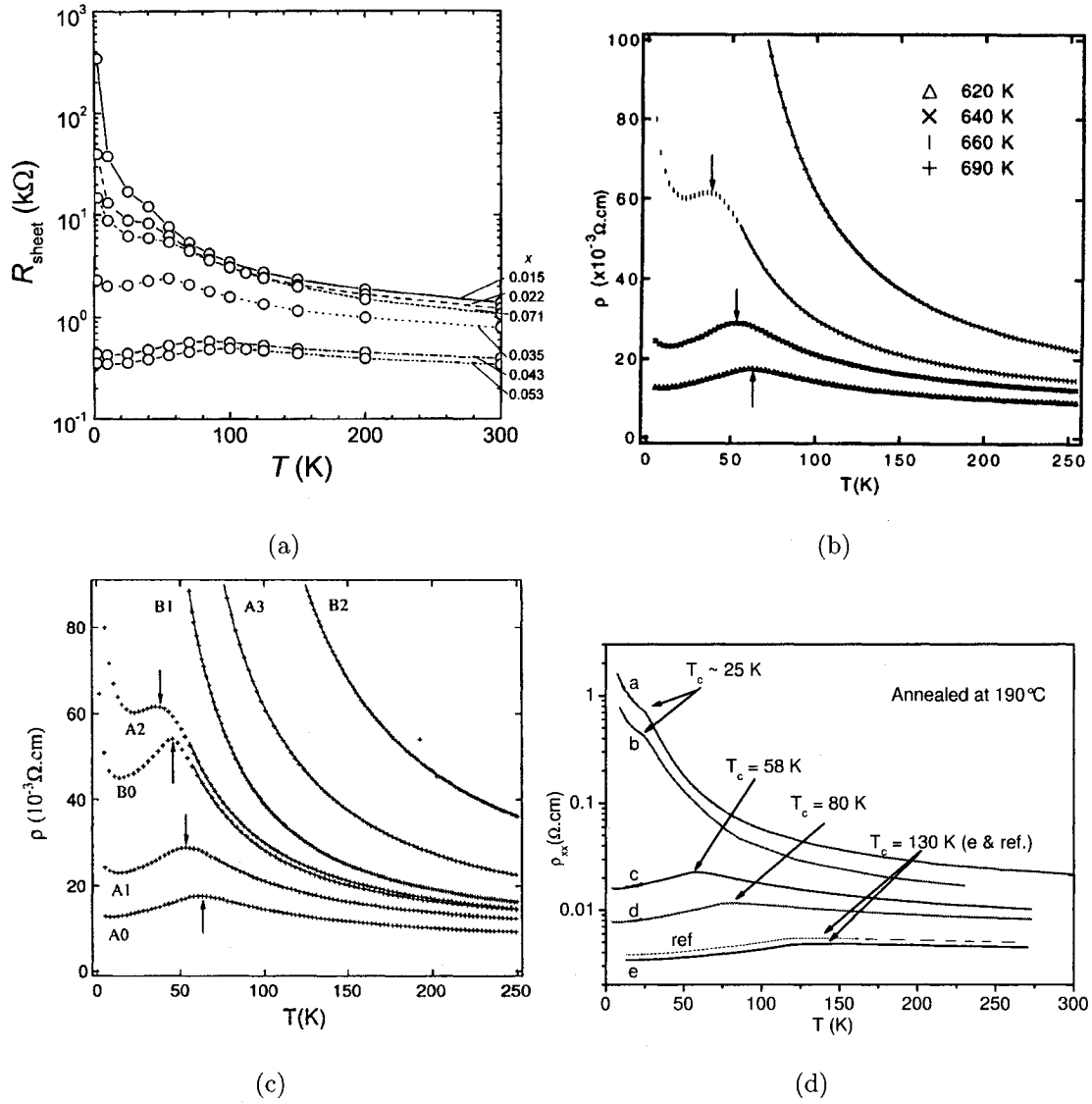


FIG. 1.1 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction de la température. (a) Résistance pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec x entre 0,015 et 0,07 (Ohno, 1999). (b) Résistivité pour un échantillon $\text{Ga}_{0,94}\text{Mn}_{0,06}\text{As}$ soumis à différents recuits (Van Esch *et al.* (a), 1997). (c) Résistivité pour des échantillons $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,06$ (A) et $x = 0,07$ (B), avant et après recuit (Van Esch *et al.* (b), 1997). (d) Résistivité pour des échantillons recuits après hydrogénisation et pour l'échantillon référence (Thevenard *et al.*, 2005)

Pour la Figure 1.1(a), Ohno (Ohno, 1999) nous dit que la dépendance en température ($2-300K$) de la résistivité à champ magnétique nul pour les couches avec une composition en Mn intermédiaire (x entre 0,035 et 0,053) montre qu'elles sont sur le côté métallique de la transition métal-isolant, alors que celles avec des concentrations x basses et élevées sont du côté isolant. À la température de Curie, tous les échantillons montrent une bosse qui est plus prononcée pour les échantillons métalliques. Les auteurs attribuent cette dépendance anormale en température à la diffusion critique, dans laquelle les porteurs sont diffusés par les fluctuations magnétiques au travers d'une interaction d'échange, ce qui s'oppose à la proposition de Van Esch *et al.* (Van Esch *et al.* (a), 1997; Van Esch *et al.* (b), 1997) sur laquelle nous reviendrons plus bas. Bien au-dessus de T_c , les dépendances au champ magnétique de la résistivité et de la résistivité de Hall sont bien décrites par la supposition que la diffusion est causée par le désordre de spin et donnent ainsi du poids à l'explication émise pour la bosse à T_c .

Pour les Figures 1.1(b) et 1.1(c), Van Esch *et al.* (Van Esch *et al.* (a), 1997; Van Esch *et al.* (b), 1997) affirment qu'au-dessus de T_c , le transport montre un comportement typique de systèmes proches de la transition métal-isolant pour des matériaux désordonnés (Il faut considérer ceci dans le sens où, dans un matériau désordonné, les états près des bords de bande sont localisés et ceux plus à l'intérieur sont étendus. Les bords de mobilité ε_c sont définis comme les séparations entre les états localisés et étendus.) Selon eux, le système serait proche de basculer entre les deux types d'états et, ainsi, de changer de comportement pour la résistivité en fonction de la température. En utilisant une expression de $\rho(T)$ au-dessus de T_c qui tient compte de ε_c et de la diffusion des phonons, mais pas des effets de spin, ils réussissent à bien reproduire les courbes pour $T > T_c$, ce qui est différent de l'interprétation de (Ohno, 1999), comme discuté précédemment. Dans leur cas, le recuit induit une augmentation générale de la résistivité qu'ils attribuent à la dimi-

nution de complexes Mn-trous. Au dessus de T_c , la contribution magnétique à la mobilité serait constante, tandis qu'au dessous de T_c , le comportement est, selon eux, le résultat de changements dans la diffusion par le désordre des spins et dans le mécanisme de conduction. La chute initiale au-dessous de T_c serait le résultat de l'augmentation de la mobilité due à la création de l'ordre magnétique. En dessous d'environ $10K$, l'aimantation atteint la saturation. La diffusion due aux spins devient alors constante et le comportement de la résistivité dépend seulement des positions relatives de l'énergie de Fermi E_f et du bord de mobilité ε_c .

Enfin, la Figure 1.1(d) présente les résultats très récents obtenus par Thevenard *et al.* (Thevenard *et al.*, 2005), où ils proposent une méthode pour contrôler les propriétés des DMS basée sur le recuit d'échantillons GaMnAs hydrogénés. L'hydrogène réduit grandement la densité de porteurs en neutralisant les impuretés Mn. Le recuit enlève les atomes d'hydrogène, augmentant ainsi la densité de porteurs pour une fraction constante de Mn. Par contre, la mesure précise de cette densité n'est pas encore au point. Pour les recuits à plus basse température, où le moins d'hydrogène est enlevé, la densité de porteurs est très faible et le système est isolant pour toutes les températures, mais montre quand même un changement à T_c . Lorsque la densité de porteurs redevient assez élevée, la résistivité en fonction de la température recommence à montrer une transition métal-isolant. Ces données semblent indiquer que le comportement dépend de façon dominante de la densité de porteurs. Les résultats de (Ohno, 1999) semblaient indiquer que la fraction de Mn était le paramètre déterminant, mais l'erreur provient du fait que la densité de porteurs ne pouvait être modifiée en gardant x constant, donc $p \propto x$.

D'autres groupes se sont penchés sur l'effet du recuit pour des échantillons dans l'état métallique, c'est-à-dire présentant une transition métal-isolant à T_c . Leurs travaux montrent que le recuit n'augmente pas nécessairement de façon globale la

résistivité comme rapporté par Van Esch *et al.* (Van Esch *et al.* (a), 1997; Van Esch *et al.* (b), 1997), mais peut aussi la réduire. La Figure 1.2 montre trois exemples du comportement de la résistivité lors d'un recuit.

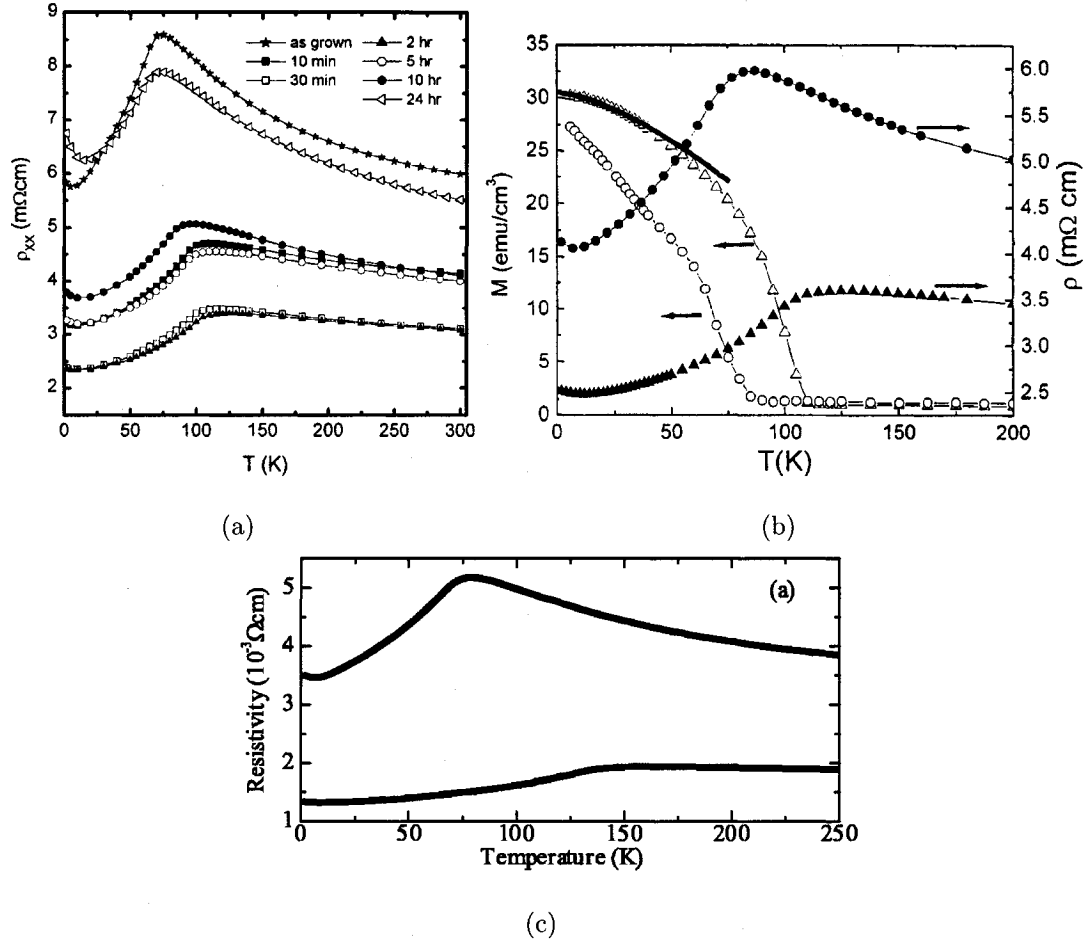


FIG. 1.2 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction de la température lors de recuits. (a) Différents temps de recuits à 250°C pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,083 \pm 0,002$ (Potashnik *et al.*, 2001). (b) Aimantation et résistivité en fonction de la température pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,0597$ (cercles, comme crû ; triangles, recuit) (Potashnik *et al.*, 2002). (c) Échantillon $\text{Ga}_{0,94}\text{Mn}_{0,06}\text{As}$ tel que crû et après recuit à 175°C (Edmonds *et al.*, 2002)

La Figure 1.2(a) nous apprend que pour des recuits courts, la résistivité est globalement réduite, alors que pour des longs recuits, elle se remet à augmenter. Notons aussi qu'une réduction de la résistivité s'accompagne d'une augmentation de la température de Curie.

Penchons-nous maintenant sur l'effet d'un champ magnétique sur la résistivité. Du point de vue de la résistivité en fonction de la température, pour un échantillon métallique, l'ajout d'un champ magnétique abaisse le maximum, soit le point de transition métal-isolant, et le déplace à une température supérieure. Ce comportement est montré sur la Figure 1.3 qui est une reproduction de la Figure 1.1(a) avec en figure insérée les résultats pour $x = 0.053$ soumis à plusieurs champs magnétiques.

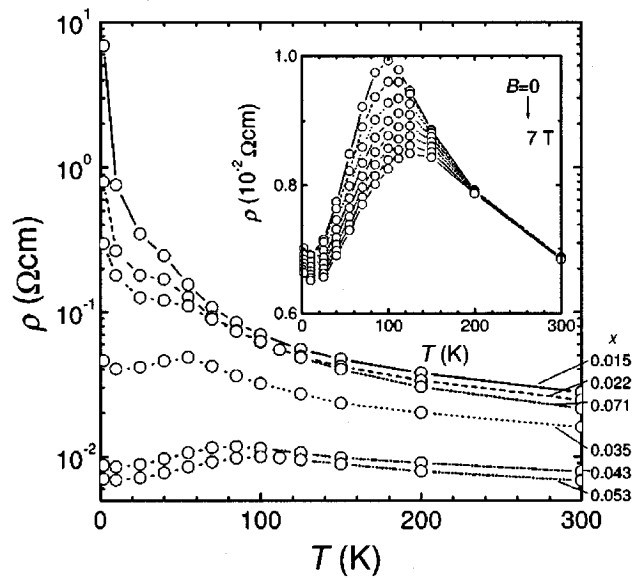


FIG. 1.3 Dépendance en température de la résistivité pour $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec x entre 0,015 et 0,071 (Matsukura *et al.*, 1998). La figure insérée est une vue agrandie pour l'échantillon avec $x = 0,053$ autour de T_c avec la dépendance en champ magnétique.

Typiquement, lorsque l'axe facile d'aimantation est selon le plan de l'échantillon et que le champ magnétique est appliqué selon l'axe perpendiculaire à ce même plan, la résistivité en fonction du champ pour une température donnée se comporte comme les deux exemples présentés sur la Figure 1.4.

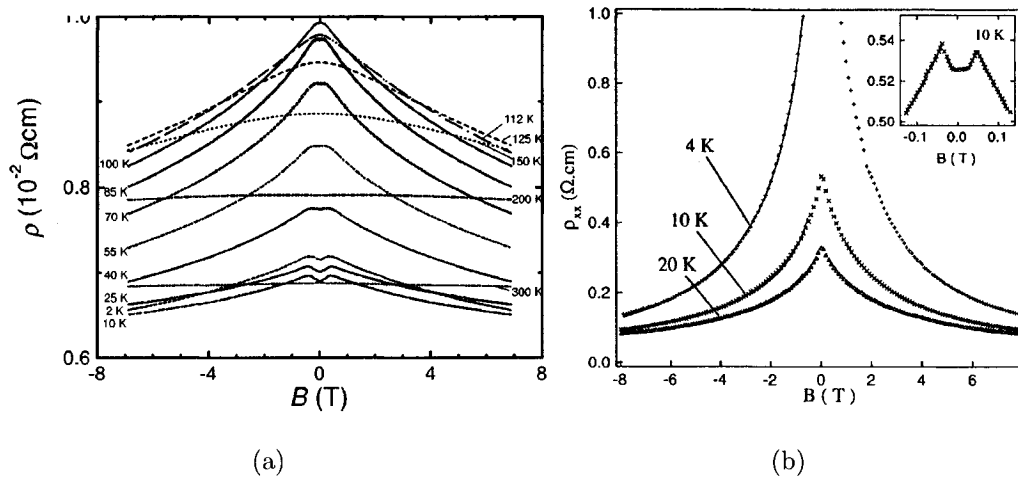


FIG. 1.4 Mesures expérimentales de la résistivité en fonction du champ magnétique externe. (a) Échantillon de $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ avec la température comme paramètre (Matsukura *et al.*, 1998). La fraction de Mn est $x = 0,053$. (b) Échantillon de $\text{Ga}_{0,913}\text{Mn}_{0,087}\text{As}$ (Van Esch *et al.* (b), 1997). La figure insérée montre une vue agrandie autour de $B = 0$ pour $T = 10$ K.

La Figure 1.4(a) peut-être réarrangée pour présenter la magnéto-résistivité et la Figure 1.5 nous montre le résultats pour trois températures.

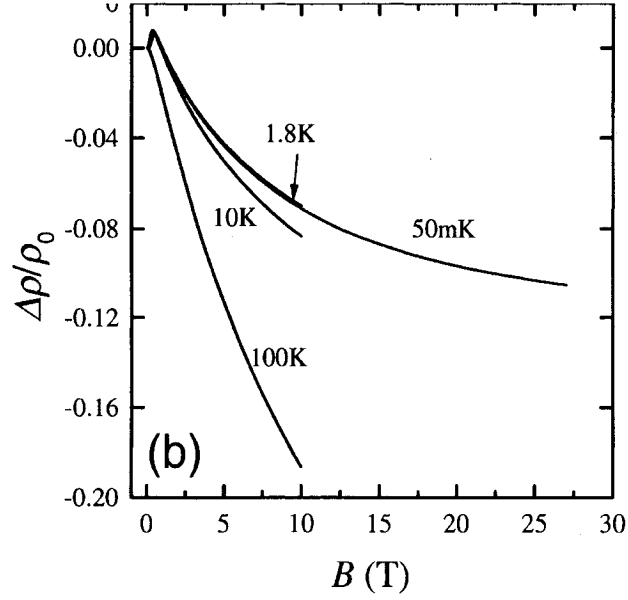


FIG. 1.5 Magnéto-résistivité pour un échantillon $\text{Ga}_{0.947}\text{Mn}_{0.053}\text{As}$ (Omiya *et al.*, 2000)

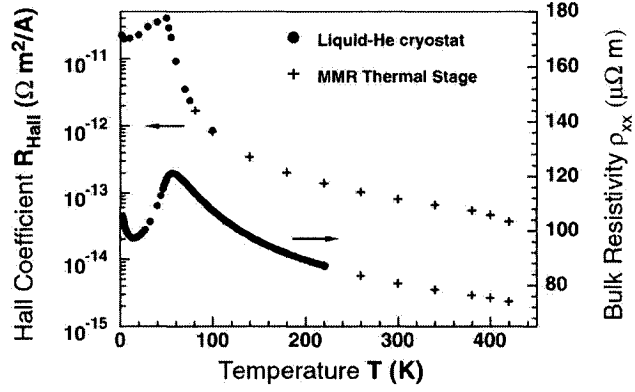
Aux températures assez élevées, les Figures 1.4 et 1.5 montrent que la résistivité diminue avec le champ et qu'ainsi, la magnéto-résistivité est négative. À haut champ, la magnéto-résistivité tend à saturer, puisque l'aimantation devient saturée. La diminution de la résistivité en fonction du champ provient de l'alignement des spins localisés, ce qui force les trous à se polariser de façon antiparallèle au champ. Dans l'espace du spin, les porteurs voient de l'ordre et ainsi, la conduction est plus facile. À basse température, les Figures 1.4 et 1.5 montrent que la magnéto-résistivité est positive pour les champs faibles. Ceci est dû à la rotation de l'aimantation de la direction dans le plan (selon l'axe facile) à la direction du champ, c'est-à-dire que le champ doit tout d'abord aligner les domaines magnétiques selon sa direction.

1.1.2 Coefficient(résistivité) de Hall

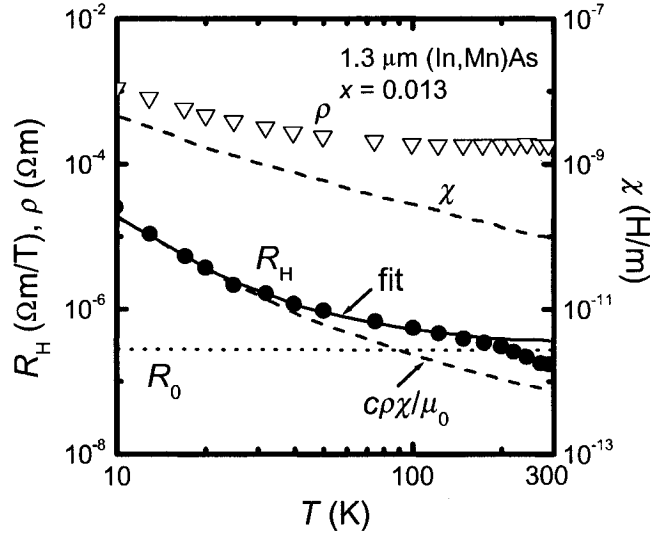
Avant de présenter les résultats expérimentaux se rapportant à l'effet Hall, il faut discuter de l'aimantation, puisque, comme nous l'avons vu dans l'introduction, l'aimantation est un paramètre direct de l'équation (17). Dépendemment de la direction vers laquelle le champ magnétique est appliqué, le résultat pour le coefficient(résistivité) de Hall sera différent. Souvent, lorsque la couche est en compression, l'axe facile se situe dans le plan de l'échantillon, alors que lorsque la couche est en tension, il est perpendiculaire au plan de l'échantillon et, ainsi, dans la direction du champ pour l'expérience d'effet Hall (Matsukura *et al.*, 1998; Liu *et al.*, 2003; Matsukura *et al.*, 2004; Matsukura *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003). Notons quand même que ce comportement n'est pas universel. En effet, la direction de l'axe facile se modifie lorsque le ratio de l'énergie de Fermi sur la séparation énergétique de spin (*spin splitting*) diminue, ce qui signifie une baisse de l'occupation des sous bandes de trous (Matsukura *et al.*, 2004; Dietl *et al.*, 2001). Cet effet explique le changement de l'axe facile lorsque la température est diminuée pour des échantillons avec une concentration de trous suffisamment faible (Matsukura *et al.*, 2004; Takamura *et al.*, 2002; Sawicki *et al.*, 2002). Nous pouvons déjà conclure, d'après la Figure 3 (de l'introduction), que la résistivité de Hall présentera un cycle d'hystérésis pour $T < T_c$ si l'axe facile est selon la direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon, alors qu'elle ne devrait pas en présenter dans le cas contraire.

Commençons tout d'abord par nous attarder au coefficient de Hall en fonction de la température. Les résultats pour ce genre de mesures sont plutôt rares. La Figure 1.6 présente les deux résultats dont nous avons connaissance, l'un pour GaMnAs et l'autre pour InMnAs. Pour ces deux figures (Figure 1.6(a) et Figure 1.6(b)), il est possible de bien simuler les données au-dessus de T_c en utilisant

l'équation (17), mais avec une forme différente de R_S pour chacune. Dans les deux cas, les auteurs utilisent $R_S = c\rho_{xx}^n(T)$, mais leur valeurs pour n diffèrent. Pour le InMnAs, (Ohno *et al.*, 1992) utilisent $n = 1$, ce qui montre selon eux que le mécanisme de l'effet Hall anormal est la diffusion asymétrique (*skew scattering*), alors que pour les échantillons GaMnAs, (Ruzmetov *et al.*, 2004) obtiennent soit $n = 2$ ou $1 < n < 2$ dépendamment de la fraction de manganèse. Dans la théorie conventionnelle pour les échantillons métalliques, $n = 2$ signifie que le mécanisme créant l'effet Hall anormal est le saut latéral (*side-jump*), mais il semble que les données de (Ruzmetov *et al.*, 2004) ne cadrent pas avec ce mécanisme, puisqu'ils affirment que celui-ci devrait être favorisé dans les échantillons hautement résistif alors que les résultats montrent le contraire, soit que le cas $n = 2$ est seulement pour les couches à basse résistivité. Par contre, dans l'optique d'un modèle développé par Jungwirth *et al.* (Jungwirth *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003), s'il n'y a pas de désordre, nous obtenons $n = 2$. Ceci semble bien s'appliquer au cas présent, puisque (Ruzmetov *et al.*, 2004) obtiennent $n = 2$ pour les échantillons de basses résistivité, c'est-à-dire pour $x = 0,06$ et moins, ce qui signifierait que la quantité de défauts est assez petite pour que la conductivité de Hall ne soit pas significativement affectée par la diffusion et qu'ainsi, le cristal de GaMnAs peut être considéré comme étant ordonné du point de vue du transport hors diagonal σ_{xy} .



(a)



(b)

FIG. 1.6 Mesures expérimentales du coefficient de Hall en fonction de la température. (a) Échantillon de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,048$ et $T_c = 53$ K (Ruzmetov *et al.*, 2004). (b) Couche de $1,3\mu\text{m}$ de $\text{In}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,013$ d'après (Ohno *et al.*, 1992)

Nous allons finir cette section sur le comportement expérimental des DMS III-V en discutant de la résistivité de Hall en fonction du champ magnétique externe.

Lorsqu'une étude en champ est effectuée, nous analysons la résistivité de Hall plutôt que le coefficient de Hall puisque qu'étant donné sa définition (16), nous savons bien que ce dernier va diverger lorsque le champ tend vers zéro alors que la résistivité de Hall reste finie et continue. La Figure 1.7 présente trois exemples de la résistivité de Hall en fonction du champ appliqué pour des DMS métalliques. Pour deux des fenêtres, le DMS est en compression et l'axe facile se situe dans le plan de l'échantillon, alors que pour l'autre, la couche est en tension, l'axe facile étant ainsi perpendiculaire un plan.

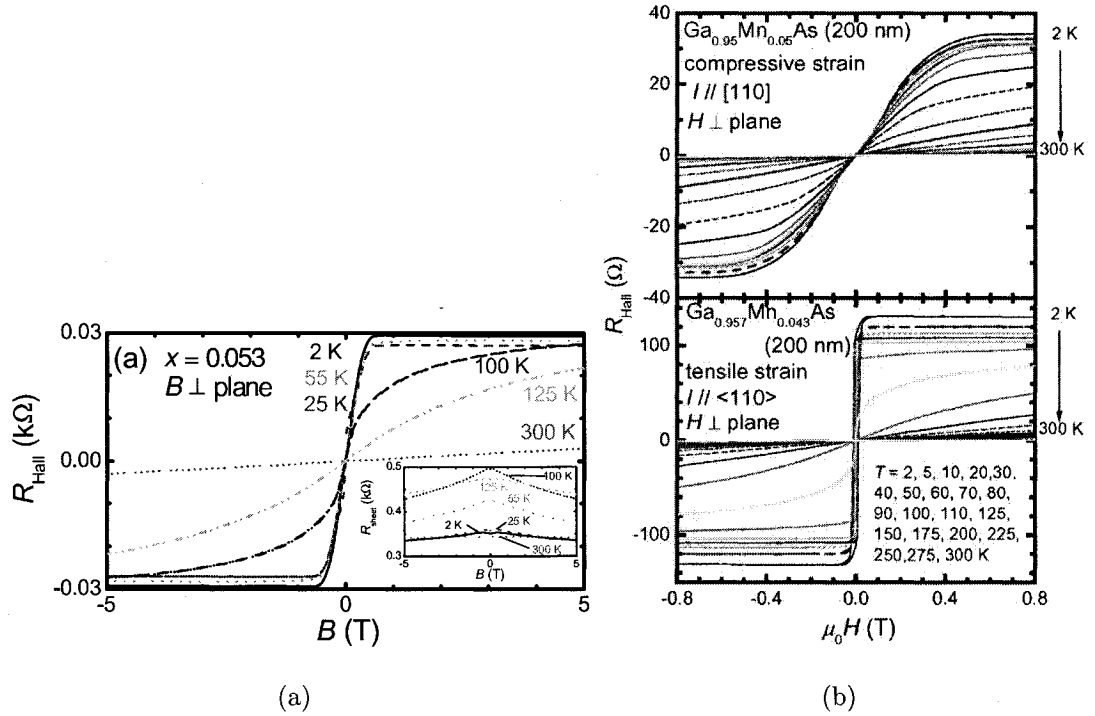


FIG. 1.7 Mesures expérimentales de la resistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué. (a) Couche de 200 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ avec $x = 0,053$ pour plusieurs températures (Matsukura *et al.*, 2002). (b) Couches $\text{Ga}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{As}/\text{GaAs}$ (compression, figure du haut) et $\text{Ga}_{0,957}\text{Mn}_{0,043}\text{As}/\text{InGaAs}$ (tension, figure du bas) pour plusieurs températures (Matsukura *et al.*, 2004)

Nous voyons bien l'effet de l'aimantation sur la résistivité de Hall. Pour la fenêtre du bas de la Figure 1.7(b), le champ est appliqué selon l'axe facile, ce qui donne des changements drastiques autour de $B = 0$, alors que pour la Figure 1.7(a) et la fenêtre du haut de la Figure 1.7(b), le champ est appliqué selon l'axe difficile, ce qui donne une montée de la résistivité de Hall plus étendue et une absence d'hystérésis à basse température. Encore une fois, l'équation (17) peut être utilisée pour bien décrire les données. Lors de la publication des premiers résultats concernant l'effet Hall en fonction du champ magnétique pour le GaMnAs, Matsukura *et al.* (Matsukura *et al.*, 1998; Ohno *et al.*, 1996) affirmaient qu'en comparant les résultats d'aimantation et de magnéto-transport, une dépendance linéaire avec la résistivité était obtenue pour R_S , $R_S = c\rho_{xx}$ et qu'ainsi, la diffusion assymétrique (*skew scattering*) était responsable de l'apparition de l'effet Hall anormal. Plus récemment (Matsukura *et al.*, 2002), ils ont relativisé leur affirmation. En effet, la comparaison des résultats d'aimantation et de magnéto-transport suggère plutôt que l'exposant n se situe entre 1 et 2 et que le choix du mécanisme (diffusion assymétrique ou saut latéral) mène à peu près aux mêmes propriétés magnétiques. Selon eux, les deux mécanismes seraient en opération dans les échantillons. Remarquons que pour un domaine de valeurs de n identiques, Matsukura *et al.* (Matsukura *et al.*, 2002) et Ruzmetov *et al.* (Ruzmetov *et al.*, 2004) tirent des conclusions différentes.

Quand le GaMnAs est dans le régime de transport par saut (*hopping transport*), c'est-à-dire lorsque le niveau de Fermi se situe dans des états localisés et que la température est basse, un porteur ne peut se mouvoir que via des sauts. Dans ces systèmes, contrairement au cas avec des états étendus, R_0 n'est certainement pas relié à la densité de porteurs, mais à l'interférence entre les amplitudes de sauts. Allen *et al.* (Allen *et al.*, 2004) ont effectué des croissances de GaAs digitalement dopés avec du Mn qui sont dans le régime de saut. Ce type de structure consiste en des mono-couches de MnAs zinc-blende séparées par des couches de

GaAs. Ils montrent que R_0 et R_S présentent des dépendances sous-linéaires avec ρ_{xx} , ce qui est inconsistent avec les modèles pour les systèmes métalliques. Aucune des résistances mesurées n'est simplement activée.

Nous avons, dans cette section, présenté les grandes lignes du comportement des DMS III-V dopés Mn par rapport au transport. Dans la section qui suit, nous allons nous intéresser aux travaux théoriques déjà existant.

1.2 Transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués du point de vue théorique

1.2.1 Résistivité et magnéto-résistivité

Lopez-Sancho et Brey (Lopez-Sancho et Brey, 2003) proposent une étude théorique pour la résistivité et la constante diélectrique du $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$. La structure électronique du semi-conducteur y est décrite par l'Hamiltonien de Kohn-Luttinger à six bandes, les fluctuations thermiques du Mn par l'approximation du champ moyen, l'interaction électron-électron par l'approximation de la phase aléatoire (RPA)(Random Phase Approximation) et les propriétés de transport en utilisant l'approximation du temps de relaxation. Les auteurs écartent le mécanisme de diffusion de spin car, selon eux, suivant le travail de (Fisher et Langer, 1968) qui utilisent aussi l'approximation du temps de relaxation, le retournement de spin (*spin-flip*) ne peut prédire de sommet à T_c pour la résistivité en fonction de la température. De plus, l'amplitude du changement de résistivité associé au phénomène de diffusion par le retournement de spin (Campbell et Fert, 1982) est un ordre de grandeur plus petit que ce qui est observé dans les DMS. Le temps de relaxation est calculé en supposant que les centres de diffusion sont les ions Mn se situant sur des sites Ga,

les ions Mn interstitiels et les anti-sites As, qui ont tous une interaction de Coulomb avec les porteurs. La résistivité obtenue a un comportement métallique pour les températures sous T_c et est constante lorsque $T > T_c$, puisque la polarisation des porteurs est nulle et qu'ainsi, la résistivité due à des impuretés est indépendante de la température. Le changement de résistivité entre $T = 0$ et $T = T_c$ est d'environ 20%, en bon accord avec les résultats pour les échantillons recuits pendant un court laps de temps (voir section précédente).

Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005) attaquent quant à eux le problème de la résistivité selon deux approches. Dans la première, en considérant les spins localisés comme des objets classiques, les propriétés électroniques du système sont calculées en utilisant la théorie du champ moyen dynamique (dynamical mean field theory) (Georges *et al*, 1996) pour tenir compte du désordre et la conductivité est obtenue avec la formule de Kubo. Dans la deuxième, ils utilisent l'équation de Boltzmann pour calculer les propriétés de transport dues à la diffusion par des impuretés ionisés écrantés. Ces deux méthodes sont appliquées pour l'étude de l'état métallique, puisque les effets de localisation ne sont pas pris en compte dans leur travail. Leurs conclusions sont semblables à celles de Lopez-Sancho *et al*. (Lopez-Sancho et Brey, 2003). En effet, ils croient que le transport est dominé par la diffusion avec des impuretés chargées écrantées et que l'effet de la diffusion par le désordre de spin joue un rôle mineur. Ils appuient ces affirmations en utilisant les deux propriétés génériques des DMS dans l'état métallique soient : (1) Un maximum dans $\rho(T)$ autour de $T = T_c$ et (2) une décroissance lente de $\rho(T)$ pour $T > T_c$. Ces deux comportements sont bien expliqués par leur approche avec l'équation de Boltzmann ne considérant que les impuretés ionisées. Par contre, bien qu'un maximum autour de $T = T_c$ puisse être produit par le désordre de spin, ils croient que ce processus n'est pas très important dans l'existence du maximum des courbes expérimentales. Selon leurs résultats, la deuxième propriété générique de la

résistivité, la décroissance lente à $T > T_c$, ne peut pas du tout être expliquée par la diffusion par le désordre de spin.

Kagami *et al.* (Kagami *et al.*, 2005) utilisent une approche semblable à la première de Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005), mais au lieu de considérer le spin du Mn comme un vecteur classique, ils supposent que ces spins sont de type Ising, c'est-à-dire qu'ils sont polarisés dans les directions $\pm z$. De plus, ils font aussi l'hypothèse que les porteurs sont complètement dégénérés. Ils n'obtiennent pas non plus une très bonne concordance avec l'expérience pour la résistivité. Selon eux, la localisation d'Anderson, les polarons magnétiques, ainsi que la diffusion critique causée par les corrélations magnétiques à courte portée et leur interconnexions pourraient être à l'origine de la dépendance en température de la résistivité observée. La technique pour traiter le désordre qu'ils utilisent ne tient compte d'aucune de ces possibilités puisqu'elle ne considère qu'un site plongé dans un milieu effectif.

Dans les deux premiers travaux, Lopez-Sancho et Brey (Lopez-Sancho et Brey, 2003) et Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005) semblent être bien confiants dans leur rejet du désordre de spin. Mais il faudrait peut-être attendre un peu avant d'éliminer définitivement ce mécanisme. Nous allons montrer dans ce travail, en utilisant une approche très semblable à la théorie utilisée par (Hwang et Das Sarma, 2005) et (Kagami *et al.*, 2005), qu'avec un modèle d'alliage où l'élément présentant la plus petite fraction possède un spin localisé traité quantiquement et où le transport est traité dans l'approche quantique de Kubo sans faire l'approximation du temps de relaxation, la résistivité en fonction de la température, dont la diffusion s'opère par interaction de spin, peut présenter, pour certains paramètres, un sommet dans la courbe de résistivité en fonction de la température, une amplitude similaire à celle obtenue expérimentalement pour les DMS et une faible

décroissance de $\rho(T)$ avec T pour $T > T_c$.

D'un autre côté, dans certains échantillons, la résistivité a un comportement isolant pour toutes les températures. Dans ces systèmes, le transport est l'oeuvre de porteurs localisés et la densité de porteurs de charge est hautement inhomogène. Comme ce sont ces mêmes charges qui transmettent l'interaction magnétique, l'échange est lui aussi très inhomogène. Ainsi, quand la température est diminuée, la transition ferromagnétique apparaît tout d'abord de façon locale, dans les régions où les densités de porteurs sont les plus grandes. À mesure que la température diminue, ces régions finies, qui ont des dimensions et des positions aléatoires, vont grossir et fusionner jusqu'à ce que, finalement, la corrélation ferromagnétique s'étende sur tout l'échantillon. Dans (Kaminski et Das Sarma, 2003), Kaminski et Das Sarma tentent d'établir la connection entre la transition ferromagnétique et les propriétés de transport dans les DMS $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ contenant des porteurs localisés. Kaminski et Das Sarma utilisent une expression pour la résistivité qui dépend exponentiellement de T :

$$\rho \propto e^{\frac{E_{saut}}{k_B T}}, \quad (1.1)$$

où E_{saut} est l'énergie décrivant le saut d'un porteur d'un site à l'autre qui dépend du désordre et du magnétisme. Leurs résultats théoriques sont qualitativement en accord avec les données expérimentales pour les systèmes dans le régime isolant où, par exemple, ρ augmente fortement avec T qui diminue, lorsque $T \rightarrow 0$ (voir par exemple (Matsukura *et al.*, 1998; Potashnik *et al.*, 2002; Nazmul *et al.*, 2003)). Le champ magnétique a aussi été inclus dans leur calcul.

1.2.2 Coefficient(résistivité) de Hall

Pour le cas métallique, nous pouvons séparer les modèles en deux catégories. Dans le premier cas, l'effet Hall anormal est considéré comme dérivant de l'interaction spin-orbite intrinsèque du semi-conducteur hôte. Dans le deuxième, l'approche traditionnelle est adoptée : l'existence de l'effet Hall anormal proviendrait d'une composante de couplage spin-orbite dans l'interaction entre les quasi-particules de bandes et les défauts cristallins, ce qui peut résulter en la diffusion asymétrique et le saut latéral, qui sont respectivement proportionnels à ρ_{xx} et ρ_{xx}^2 comme nous en avons déjà discuté.

La première approche est celle qui a été suivie par Jungwirth *et al.* (Jungwirth *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003). Dans leurs travaux, la théorie est construite sur une description par champ moyen dans laquelle les bandes de valence du semi-conducteur non dopé décrite par l'hamiltonien de Kohn-Luttinger sont séparées par un champ effectif proportionnel à l'aimantation locale moyenne, qui résulte des interactions d'échange avec les spins localisés des ions Mn. Dans (Jungwirth *et al.*, 2003), ils considèrent aussi la présence du désordre en supposant un temps de vie fini pour les états de quasi-particules. Selon eux, en général, quand le désordre est pris en compte, la théorie est en bon accord avec les données expérimentales sur le domaine complet des fractions de Mn étudiées (de $x = 1,5\%$ à $x = 8\%$).

Dans le cas de la deuxième approche, nous ne pouvons pas vraiment parler de développement d'un modèle, puisque que les auteurs discutant de ces mécanismes utilisent les travaux déjà publiés depuis de nombreuses années (voir par exemple (Chazalviel, 1975)) pour tenter des comparaisons et discuter du mécanisme qui devrait être responsable de l'effet Hall anormal. En supposant que la diffusion par les impuretés ionisées domine et que la théorie de l'effet Hall anormal pour les électrons

dans les semi-conducteurs (Chazalviel, 1975) est applicable aux semi-conducteurs de type p, Dietl *et al.* (Dietl *et al.*, 2003) utilisent une expression pour le ratio de la conductivité de Hall causée par le saut latéral et la diffusion asymétrique pour $T = 0$ et concluent que le saut latéral devrait être le bon mécanisme. Il est important de noter que les mêmes données expérimentales ont été souvent utilisées par ces auteurs. À la fin des années 90, ils concluaient que R_S était proportionnel à ρ_{xx} et qu'ainsi la diffusion asymétrique était responsable de l'effet Hall anormal (Matsukura *et al.*, 1998; Ohno, 1999). Plus tard, en 2002 (Matsukura *et al.*, 2002), ils prétendaient plutôt que R_S avait une dépendance avec la résistivité de la forme ρ_{xx}^n , où n est entre 1 et 2, impliquant la présence des deux mécanismes à la fois. Comme nous venons de le voir, en 2003 (Dietl *et al.*, 2003), ils ont de nouveau modifié le tir et affirment maintenant que le saut latéral opère seul. Notons aussi que l'équation pour le ratio en est une pour des électrons dans la bande de conduction et est appliquée pour des trous lourds. Contrairement aux électrons, les trous ont une interaction spin-orbite intrinsèque, impuretés ou pas, et celle-ci devrait avoir une influence sur l'effet Hall anormal. Il faut donc être prudent avec les affirmations de Dietl *et al.*

Tous ces modèles décrivent les porteurs par des états étendus, alors qu'il est aussi possible d'avoir des échantillons isolants. Burkov et Balents (Burkov et Balents, 2003) ont traité le problème de ce point de vue. Ils supposent que l'énergie de Fermi se situe dans une région où tous les états sont localisés. Ainsi, le seul mécanisme de conduction possible est au travers de sauts assistés par les phonons. Le modèle utilise des trous de spin 3/2 sautant entre des centres localisés (Mn) aléatoirement distribués et baignant dans un champ effectif de spins localisés $S = 5/2$. Leur théorie semble être consistante avec des expériences récentes de magnéto-transport sur des échantillons GaMnAs dopés digitalement (Allen *et al.*, 2004).

Le lecteur, après avoir consulté les articles cités ici et traitant de l'effet Hall, pourra être surpris de constater que nous n'avons pas abordé la question de la densité de porteurs mesurée à partir des résultats de l'effet Hall. La raison est que nous sommes quelque peu embêtés par les affirmations des auteurs des travaux expérimentaux. En effet, ceux-ci modélisent le coefficient de Hall normal R_0 par l'expression de la théorie d'un électron presque libre, i.e $R_0 = \frac{1}{pe}$. Aucuns ne justifient l'utilisation de cette expression, alors que rien ne permet d'affirmer sans nul doute qu'elle est correct, i.e $n_{eff} = p$. Les DMS contiennent une très grande quantité d'impuretés, ce qui rend le recours à $R_0 = \frac{1}{pe}$ suspect. Même dans certains matériaux magnétiques très purs, comme le fer cubique centré (Cottam et Stikchcombes, 1968), à basse température, les résultats pour R_0 sont très différents de ce qui est prédit par les théories considérant des électrons presque libres. Nous sommes donc d'avis qu'il est difficile de faire confiance aux mesures rapportées pour la densité de porteurs en utilisant l'effet Hall. D'autres groupes ont développé des façons différentes de mesurer la densité de porteurs, par diffusion Raman (Seong *et al.*, 2002) et par mesures capacitance-voltage électrochimiques (Yu *et al.*, 2002), mais nous ne sommes pas en mesure de commenter sur la justesse de leurs mesures, n'étant aucunement familier avec ces techniques expérimentales.

Dans ce chapitre, nous avons présenté, de façon générale, les caractéristiques les plus importantes par rapport au transport dans les DMS et les explications théoriques couramment avancées. Dans le suivant, nous allons discuter du point de vue que nous avons choisi d'adopter pour ce travail et de la niche que nous allons occuper.

CHAPITRE 2

MÉTHODOLOGIE

2.1 Contexte

Il est évident, après cette revue de la littérature, que le nombre de travaux portant sur le transport dans les DMS au niveau théorique est limité et qu'aucune étude systématique d'un modèle précis n'est disponible. Ceci constitue un grand manque puisque que les propriétés de transport, comme déjà discuté dans l'introduction, sont la pierre angulaire de la création de dispositifs intéressants.

Les effets magnétiques et le désordre dans le transport ont été et sont toujours des domaines en pleine effervescence et comportent encore beaucoup d'incompréhension. Le traitement utilisant l'approche des liaisons fortes pour la magnéto-résistance et l'effet Hall dans les alliages désordonnés a été l'objet de nombres d'études au cours des années 70 et 80. De celles-ci, nous pouvons retirer une approche cohérente pour attaquer le transport dans les DMS, en suivant les suppositions discutées dans la Section 0.3. Il est important de noter que ces approches utilisent directement les développements survenant dans le calcul des propriétés électroniques des matériaux désordonnés. Il existe déjà des bons modèles traitant des systèmes où le désordre est composé d'impuretés magnétiques. Par contre, l'intégration de ces modèles dans un calcul systématique portant sur l'effet Hall n'a pas été réalisée.

2.2 Objectif

Ce projet consiste à étudier un système contenant une importante quantité d'impuretés magnétiques. Comme mentionné auparavant, nous disposons déjà de modèles pour le calcul des propriétés électroniques d'un alliage et d'une approche cohérente pour le transport. Ainsi, nous nous appliquons à bâtir des ponts entre ces différentes techniques. Lorsque nécessaire, nous devons aussi continuer le développement de ces techniques pour permettre qu'elles soient reliées. De façon plus précise, comme nous l'avons vu, les effets magnétiques dans les DMS sont causés par l'interaction de spin entre les trous mobiles et les ions localisés. Par contre, selon plusieurs auteurs (Lopez-Sancho et Brey, 2003; Hwang et Das Sarma, 2005; Kagami *et al.*, 2005), ce mécanisme ne suffit pas à expliquer les propriétés mesurées de la résistivité en fonction de la température. Pour eux, la clé se trouve dans la diffusion de Coulomb par les impuretés. Considérant qu'il ne faut pas laisser tomber la diffusion par le spin aussi vite, nous calculons, pour un grand nombre de paramètres d'un même modèle, différentes propriétés de transport, contrairement à l'approche des auteurs cités dans le Chapitre 1, qui se concentrent soit sur la résistivité à champ nul ou sur l'effet Hall. Cette approche nous permet d'émettre des conclusions plus solides par rapport à l'importance de l'interaction entre les spins à propos du processus de conduction dans les DMS III-V.

2.3 Approche

Contrairement à Lopez-Sancho *et al.* (Lopez-Sancho et Brey, 2003), la structure de la bande de valence du GaAs que nous utilisons est simple et est celle adoptée par Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005) et Kagami *et al.* (Kagami *et al.*, 2005). Les spins localisés causant le désordre sont traités quantiquement et le

retournement de spin (spin-flip) est pris en compte, contrairement à Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005), qui les traitent classiquement ou Kagami *et al.* (Kagami *et al.*, 2005), qui considère un modèle Ising ou encore Lopez-Sancho et Brey (Lopez-Sancho et Brey, 2003) et Jungwirth *et al.* (Jungwirth *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003), qui considèrent l'effet de ces spins comme un champ moyen dans l'Hamiltonien. Les propriétés électroniques du DMS sont calculées selon une approche de milieu effectif. Dans ce genre modèle, nous traitons l'Hamiltonien pour un seul site de façon exacte et considérons l'effet des autres au travers d'un milieu moyen entourant le site choisi. Nous montrons que pour cette approche, les équations de notre milieu avec spin peuvent s'écrire de telle sorte qu'elle revêtent la forme usuelle pour un système sans interaction de spin et qu'il est facile de déterminer le voisinage des états énergétiques dues aux impuretés magnétiques.

Ces propriétés électroniques sont ensuite utilisées dans les équations du transport. L'utilisation d'une bande qui correspond à une structure cristalline hypercubique en d dimensions est une approche commune en théorie de la matière condensée, mais contrairement à l'expression de la conductivité longitudinale, il n'existe pas, à notre connaissance, une expression complète pour le coefficient de Hall, peu importe le nombre de dimensions. Nous nous appliquons donc à produire ce résultats et nous développons ensuite les équations du transport obtenues pour le cas tridimensionnel. De ces expressions, nous produisons une étude du signe du coefficient de Hall, un sujet particulièrement important pour les milieux désordonnés, puisqu'il n'est pas précisément déterminé, la notion de trous perdant son sens. Finalement, les résultats numériques, majoritairement ceux impliquant l'effet Hall, sont inédits et présentent la finalité du travail, soit de mener à terme (numériquement) un modèle particulier.

CHAPITRE 3

OUTILS THÉORIQUES DE BASE

Dans ce chapitre, les divers outils théoriques importants pour ce travail sont présentés afin de fournir les bases pour les développements théoriques du Chapitre 4. En premier lieu, la seconde quantification est rapidement décrite, suivie d'une introduction aux fonctions de Green. Deuxièmement, le désordre en physique du solide est discuté et la méthode utilisée ici pour le traiter est présentée, soit l'approximation du potentiel cohérent (CPA). Ensuite, un rappel rapide du modèle des liaisons fortes est inclus. Enfin, nous donnons les résultats principaux de la théorie linéaire du transport de Kubo-Greenwood pour le tenseur de conductivité et la forme qu'elle prend dans le cas d'un Hamiltonien à un électron.

3.1 Seconde quantification

La littérature présentant de façon complète l'approche de la seconde quantification est très importante ; la référence (Taylor et Heinonen, 2002) est un exemple. Nous nous contentons donc de présenter rapidement le sujet. Imaginons un système d'électrons (trous), où chacun de ceux-ci puisse occuper un des q états disponibles et qu'au maximum deux électrons (trous) peuvent se retrouver dans un état particulier, étant donné le principe d'exclusion de Pauli. Nous pouvons créer une paire d'opérateurs pour agir sur ce système, soit

$$c_{q,s}^\dagger \quad \text{et} \quad c_{q,s}, \quad (3.1)$$

qui peuvent créer et détruire un électron (trou) de spin s dans l'état q . Comme affirmé plus haut, ces opérateurs obéissent au principe d'exclusion et ont ainsi les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} \{c_{q,s}^\dagger, c_{q',s'}^\dagger\} &= \{c_{q,s}, c_{q',s'}\} = 0 \\ \{c_{q,s}, c_{q',s'}^\dagger\} &= \delta_{qq'}\delta_{ss'}, \end{aligned} \tag{3.2}$$

où $\{A, B\} = AB + BA$ représente l'anticommutateur.

Les espaces des états qui sont utilisés ici sont la position des sites et le domaine des vecteurs d'ondes, donc $c_{i,s}^\dagger$ et $c_{k,s}^\dagger$ vont créer respectivement un électron (trou) à la position i de l'espace et un électron (trou) de quantité de mouvement cristalline k . Notons aussi que si un état q particulier est représenté par le *ket* $|q, s\rangle$, nous pouvons établir les corrélations suivantes :

$$\begin{aligned} c_{q,s}^\dagger &\rightarrow |q, s\rangle \\ c_{q,s} &\rightarrow \langle s, q|. \end{aligned} \tag{3.3}$$

3.2 Fonctions de Green

Nous présentons ici la fonction de Green intemporelle à un électron, c'est-à-dire comme solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

Une fonction de Green peut être définie comme une solution de l'équation différentielle du type (Economu, 1983)

$$[\lambda - L(\mathbf{r})]G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{3.4}$$

répondant à certaines conditions frontières. L'objet $L(\mathbf{r})$ est un opérateur Hermitique, linéaire et indépendant du temps qui possède un ensemble complet de fonctions propres, tel que

$$L(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Si, par contre, nous désirons utiliser la représentation par *bra-ket* des fonctions propres, nous devons écrire

$$[\lambda - L]G(z) = 1 \quad (3.6)$$

avec

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle. \quad (3.7)$$

Comme l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit

$$\begin{aligned} [E - H(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) &= 0 \\ [E_n - H]|\phi_n\rangle &= 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

nous pouvons faire le rapprochement

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}) &\rightarrow H(\mathbf{r}) \\ \lambda &\rightarrow E \\ \lambda_n &\rightarrow E_n \end{aligned} \quad (3.9)$$

et ainsi nous obtenons, en utilisant des relations de fermeture

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(E) &= \sum_{n_{\text{discret}}} \frac{\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n} + \int dn \frac{\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n} \\ G(E) &= \sum_{n_{\text{discret}}} \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{E - E_n} + \int dn \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{E - E_n} = \frac{1}{E - H} \\ &= \sum_{n_{\text{discret}}} c_n^\dagger \frac{1}{E - E_n} c_n + \int dn \quad c_n^\dagger \frac{1}{E - E_n} c_n, \end{aligned} \quad (3.10)$$

où $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(E) = \langle \mathbf{r} | G(E) | \mathbf{r}' \rangle$.

Nous remarquons immédiatement que la fonction de Green contient des pôles sur l'axe réel, correspondant aux valeurs propres de H . Cette fonction telle que présentée dans l'équation (3.10), n'est pas analytique pour toutes valeurs de E , mais l'ajout d'une petite partie imaginaire permet d'éliminer les pôles. Nous définissons ainsi

$$G^{r,a}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H \pm i\epsilon}, \quad (3.11)$$

avec r et a pour retardée et avancée.

Connaissant l'identité

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (3.12)$$

nous avons que

$$G^{r,a}(E) = P \frac{1}{E - H} \mp i\pi\delta(E - H), \quad (3.13)$$

ce qui démontre que la densité d'états par unité de volume (DOS) s'écrit comme

$$D(\mathbf{r}; E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{\mathbf{r}\mathbf{r}}^{r,a}(E)\}. \quad (3.14)$$

Notons qu'à partir de maintenant, pour simplifier l'écriture des expressions, nous allons omettre l'écriture de la limite pour les fonctions de Green retardées et avancées, mais elle est implicite.

De plus, si nous avons un Hamiltonien H pouvant être séparé en deux parties

$$H = H_0 + V, \quad (3.15)$$

où les fonctions propres de H_0 sont connues, il est possible d'écrire la fonction de Green de H , $G(z) = (z - H)^{-1}$ ou $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z)$ en fonction de celle de H_0 , $G^0(z) = (z - H_0)^{-1}$ ou $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}}^0(z)$ par une relation appelée équation de Dyson, qui s'exprime comme

$$\begin{aligned} G(z) &= G^0(z) + G^0(z)V G(z) \\ G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(z) &= G_{\mathbf{r}\mathbf{r}}^0(z) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_{\mathbf{r}\mathbf{r}_1}^0(z) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_{\mathbf{r}_2\mathbf{r}'}(z) \end{aligned} \quad (3.16)$$

avec z pouvant être égal à E , $E + i\epsilon$ ou $E - i\epsilon$, selon le type de fonction utilisée. Remplaçant $G(z) = (1 - G^0(z)V)^{-1}G^0(z)$ à droite de l'égalité dans (3.16), nous obtenons

$$\begin{aligned} G(z) &= G^0(z) + G^0(z)V(1 - G^0(z)V)^{-1}G^0(z) \\ &= G^0(z) + G^0(z)T(z)G^0(z), \end{aligned} \quad (3.17)$$

où $T(z) \equiv V(1 - G^0(z)V)^{-1}$ est appelée matrice ou opérateur T et dont la connaissance nous donne immédiatement accès à $G(z)$.

Nous pouvons enfin définir un dernier objet se rapportant aux fonctions de Green. Par souci de simplicité, seule la fonction retardée est utilisée, mais celle avancée peut aussi être employée.

La fonction spectrale $A(\zeta, \varepsilon)$ est définie comme

$$A(\zeta, \varepsilon) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{\zeta}^r(\varepsilon)\}. \quad (3.18)$$

Dans le domaine de la physique du solide, il est très utile de caractériser en partie le système par le vecteur d'onde k d'une excitation élémentaire, puisque celui-ci est un bon nombre quantique pour un cristal. Nous pouvons ainsi réécrire l'équation

(3.18) :

$$A(k, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_k^r(\varepsilon)\}. \quad (3.19)$$

Elle décrit à la fois la résolution de l'état quantique d'une excitation d'énergie ε et la résolution en énergie d'une excitation de nombre quantique k . De plus, cette fonction nous donne une indication sur l'exactitude de la description de l'excitation créée par l'ajout d'une particule dans l'état k par une quasi-particule sans interaction. En effet, dans le cas idéal (particule libre), la fonction spectrale est définie par un delta de Dirac. Si des interactions sont présentes, la fonction spectrale d'une excitation s'éloignera de la fonction delta, mais si elle demeure quand même un pic étroit, l'approximation que les quasi-particules n'interagissent pas ensemble n'est pas très loin de la réalité.

Il existe aussi trois relations intégrales liant premièrement, les parties réelle et imaginaire de la fonction de Green et deuxièmement, la fonction de Green à la densité d'états. Ces expressions sont

$$\begin{aligned} \text{Im}\{G^r(\varepsilon)\} &= -\frac{1}{\pi} \int \frac{\text{Re}\{G^r(\varepsilon')\} d\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon} \\ \text{Re}\{G^r(\varepsilon)\} &= \frac{1}{\pi} \int \frac{\text{Im}\{G^r(\varepsilon')\} d\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon} \\ G^r(\varepsilon) &= \int \frac{\rho(\varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon - \varepsilon' + i\delta}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Nous pouvons donc conclure cette présentation en faisant remarquer que la fonction de Green contient de l'information sur le spectre, la densité d'états et les fonctions d'ondes du système étudié, ce qui en fait un objet mathématique extrêmement utile en physique quantique.

3.3 Systèmes désordonnés

La plupart des systèmes physiques présentent, à plus ou moins grande échelle, une structure spatiale ou compositionnelle désordonnée. Même dans la cas des couches minces les plus avancées technologiquement, la présence de défauts est inévitable. La première conséquence de ceci est que le vecteur d'onde k n'est plus un bon nombre quantique. Pour l'être, celui-ci devrait, à l'aide des autres nombres quantiques, permettre de caractériser de façon unique une excitation. En d'autres termes, dans un solide parfaitement cristallin, il existe une relation d'unicité entre l'énergie et k , alors que lorsque le désordre est présent, plusieurs valeurs d'énergies pour un même k sont possibles. Nous continuons quand même à utiliser ce concept, car bien qu'inutile pour définir d'une façon exacte les états, les méthodes expérimentales basées sur la conservation de quantité de mouvement sont toujours employées et, de ce fait, la fonction spectrale définie précédemment est toujours d'actualité.

Nous avons déjà vu que dans le cas du semi-conducteur magnétique $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, lorsqu'une proportion de Mn allant de 1 à 7 % est présente dans le matériau, les atomes de Mn se répartissant sur les sites Ga de façon aléatoire. Il est donc indiscutable que le désordre devrait être un facteur important dans les propriétés physiques mesurables.

Spécifions ici qu'en général, le calcul des quantités expérimentales implique une sommation sur tous les sites d'un échantillon macroscopique. Le nombre de sites étant extrêmement grand, la mesure ne devrait pas dépendre de la nature particulière d'une configuration de désordre, mais bien de la moyenne sur toutes les configurations possibles. Kohn et Luttinger (Kohn et Luttinger, 1957) ont présenté une preuve mathématique de cette dernière affirmation. Pour cette raison, nous

nous intéressons seulement à la moyenne de la fonction de Green.

Habituellement, la valeur moyenne de la fonction de Green $\langle G(\varepsilon) \rangle$ ne peut être calculée de façon exacte, ce qui nous oblige à définir des approximations spécifiques pour le désordre étudié. Considérons l'Hamiltonien du système comme une matrice $N \times N$, où N est le nombre de sites. Tous les termes de cette matrice peuvent être sujet à l'aléatoire, mais nous allons quand même supposer que seuls les termes diagonaux le sont, alors que ceux non-diagonaux ne changent pas, c'est-à-dire qu'un électron (trou) saute d'un site à l'autre toujours de la même façon, mais que dès qu'il se trouve sur un site particulier, l'énergie qu'il voit est aléatoire. Ensuite, nous supposons que les électrons (trous), au lieu de se mouvoir dans le milieu réel, se déplacent dans un milieu effectif (caractérisé par une *self-energy* complexe $\Sigma(\varepsilon)$), choisi de telle sorte que les prédictions des propriétés physiques des électrons (trous) soient les bonnes. L'approche qui est présentée ici, appelée approximation du potentiel cohérent (CPA), suppose que la description physique voulue est celle d'un électron (trou) ou d'un phonon dans un alliage qui se propage en une succession de diffusions. Les observables sont donc calculées en faisant la moyenne de ces diffusions sur toutes les configurations atomiques. Comme nous le verrons, il s'agit une approximation à un site, c'est-à-dire que les diffusions multiples sont négligées et, de plus, l'interaction électron-électron n'est pas prise en compte. Cette approche s'avère souvent très efficace et diverses dérivations sont disponibles. Nous sommes d'avis que celle présentée par Vilecky *et al.* (Velicky *et al.*, 1968) est la plus claire et, pour permettre au lecteur de bien comprendre, nous reproduisons ici sa dérivation de façon complète.

Nous considérons un alliage binaire comme étant une maille strictement périodique contenant N sites équivalents, mais dont chacun d'eux est occupé de façon aléatoire par des atomes de type A ou B. Les porteurs sont décrits dans l'approximation de

la particule seule (*single electron approximation*). L'Hamiltonien à une particule correspondant à l'alliage pour une configuration donnée est noté H . Les propriétés physiques sont ainsi contenues dans la fonction de Green à un corps

$$G^r = (z - H)^{-1}, \quad (3.21)$$

où $z = \varepsilon + i\epsilon$.

Les propriétés macroscopiques sont quant à elles déterminées par la moyenne sur toutes les configurations, soit $\langle G^r \rangle$. Définissons un Hamiltonien effectif, qui sera caractéristique du cristal moyen. Celui-ci doit correspondre à

$$\langle G^r \rangle = (z - H_{eff})^{-1}. \quad (3.22)$$

Notons que H_{eff} a la symétrie du cristal.

Imaginons maintenant un Hamiltonien P , une approximation de H_{eff} . Par conséquent, celui-ci doit avoir les mêmes propriétés analytiques. La fonction de Green correspondante à P est

$$G^{r,0} = (z - P)^{-1}. \quad (3.23)$$

Nous pouvons ainsi, à l'aide de l'équation de Dyson, écrire $\langle G^r \rangle$ de la façon suivante :

$$\langle G^r \rangle = G^{r,0} + G^{r,0}(H_{eff} - P)\langle G^r \rangle. \quad (3.24)$$

Nous rappelant aussi de la définition de la matrice T , nous écrivons

$$G^{r,0} + G^{r,0}(H_{eff} - P)\langle G^r \rangle = G^{r,0} + G^{r,0}\langle T \rangle G^{r,0} \quad (3.25)$$

$$G^{r,0} + G^{r,0}(H_{eff} - P)(G^{r,0} + G^{r,0}\langle T \rangle G^{r,0}) = G^{r,0} + G^{r,0}\langle T \rangle G^{r,0}. \quad (3.26)$$

Étant donné que, de façon générale, les fonctions de Green sont des matrices, multiplions (3.26) par la gauche et par la droite, de chaque côté de l'égalité, par $[G^{r,0}]^{-1}$:

$$\begin{aligned} H_{eff} + H_{eff}G^{r,0}\langle T \rangle - P - PG^{r,0}\langle T \rangle &= \langle T \rangle \\ H_{eff}(I + G^{r,0}\langle T \rangle) - P(I + G^{r,0}\langle T \rangle) &= \langle T \rangle. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Enfin, multipliant chaque côté de l'égalité par $(I + G^{r,0}\langle T \rangle)^{-1}$ par la droite, nous obtenons l'expression suivante pour H_{eff} :

$$H_{eff} = P + \langle T \rangle (I + G^{r,0}\langle T \rangle)^{-1}. \quad (3.28)$$

La meilleure approximation possible pour H_{eff} est bien sûr $P = H_{eff}$. D'après (3.28), cette condition est remplie lorsque

$$\langle T[P] \rangle = 0. \quad (3.29)$$

Bien que nous ayons une condition **exacte** pour la construction du milieu effectif, le calcul de l'opérateur T est une tâche *a priori* presque aussi complexe que de calculer directement $G = (z - H)^{-1}$. Nous devons donc trouver une condition pour l'obtention du milieu effectif plus simple à calculer.

Pour la suite de la dérivation, nous allons supposer que la différence $H - P$ peut être décomposée en une somme des contributions provenant de chaque site, c'est-à-dire,

$$H - P = \sum_n v_n. \quad (3.30)$$

En utilisant exactement la même démarche que pour le calcul de (3.28) et en combinant les identités

$$\begin{aligned} G^r &= G^{r,0} + G^{r,0} T G^{r,0} \\ G^r &= G^{r,0} + G^{r,0} (H - P) G^r, \end{aligned} \quad (3.31)$$

nous obtenons

$$T = (H - P)(I + G^{r,0} T). \quad (3.32)$$

Avec (3.30) nous avons

$$T = \sum_n v_n (I + G^{r,0} T) \equiv \sum_n Q_n. \quad (3.33)$$

Attardons-nous maintenant à développer le terme Q_n :

$$\begin{aligned} Q_n &= v_n (I + G^{r,0} T) \\ &= v_n (I + G^{r,0} \sum_m Q_m) \\ &= v_n (I + G^{r,0} Q_n + G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m) \\ &= v_n + v_n G^{r,0} Q_n + v_n G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m \end{aligned} \quad (3.34)$$

Nous obtenons ainsi

$$Q_n = (I - v_n G^{r,0})^{-1} v_n (I + G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m). \quad (3.35)$$

Si, par comparaison avec (3.32), nous créons un opérateur de diffusion t_n pour un site, nous avons

$$\begin{aligned} t_n &\equiv v_n (I + G^{r,0} t_n) \\ t_n &= (I - v_n G^{r,0})^{-1} v_n. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Nous réécrivons ainsi (3.35) comme

$$Q_n = t_n(I + G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m). \quad (3.37)$$

Si, enfin, nous remplaçons (3.37) dans (3.33), l'opérateur de diffusion total T devient

$$T = \sum_n t_n + \sum_n t_n G^{r,0} \sum_{m \neq n} t_m + \dots \quad (3.38)$$

Pour l'obtention des quantités macroscopiques, nous sommes plutôt intéressés à connaître l'expression moyenne de T , qui est nulle par définition (3.29) :

$$\langle T \rangle = \sum_n \langle Q_n \rangle = 0 \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \langle Q_n \rangle &= \left\langle t_n(I + G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m) \right\rangle \\ &= \langle t_n \rangle + \langle t_n G^{r,0} \sum_{m \neq n} Q_m \rangle + \underbrace{\left[\langle t_n \rangle G^{r,0} \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle - \langle t_n \rangle G^{r,0} \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle \right]}_{\text{Nous ajoutons 0}} \quad (3.40) \\ &= \langle t_n \rangle \left(I + G^{r,0} \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle \right) + \left\langle t_n G^{r,0} \sum_{m \neq n} (Q_m - \langle Q_m \rangle) \right\rangle \end{aligned}$$

Jusqu'ici, le résultat est tout à fait exact. Le premier terme de l'équation correspond à l'effet de l'onde effective moyenne vue par le $n^{\text{ième}}$ atome. Le deuxième, quant à lui, décrit les fluctuations de cette onde effective. L'approximation du potentiel cohérent (CPA) consiste à négliger le difficile terme des fluctuations. Nous obtenons ainsi

$$\langle Q_n \rangle = \langle t_n \rangle \left(I + G^{r,0} \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle \right). \quad (3.41)$$

Les fluctuations sont la conséquence de la corrélation statistique entre le site n et les m autres sites. Cette corrélation provient de l'ordre à courte portée, éliminé par

hypothèse, ainsi que des diffusions multiples. Nous constatons que notre approche néglige les diffusions multiples, qui sont toujours présentes. Notre approximation correspond donc à un site plongé dans un milieu effectif.

Nous voulons maintenant trouver l'expression de H_{eff} (3.28) dans le cadre de la CPA. Commençons par réécrire (3.41) en utilisant $T = Q_n + \sum_{m \neq n} Q_m$:

$$\begin{aligned}\langle Q_n \rangle &= \langle t_n \rangle + \langle t_n \rangle G^{r,0} \langle T \rangle - \langle t_n \rangle G^{r,0} \langle Q_n \rangle \\ \langle Q_n \rangle &= (I + \langle t_n \rangle G^{r,0})^{-1} \langle t_n \rangle (I + G^{r,0} \langle T \rangle),\end{aligned}\tag{3.42}$$

ce qui donne, pour $\langle T \rangle$,

$$\langle T \rangle = \sum_n (I + \langle t_n \rangle G^{r,0})^{-1} \langle t_n \rangle (I + G^{r,0} \langle T \rangle).\tag{3.43}$$

Dans (3.28), nous avons le terme $\langle T \rangle (I + G^{r,0} \langle T \rangle)^{-1}$ qui, selon (3.43), s'écrit comme

$$\langle T \rangle (I + G^{r,0} \langle T \rangle)^{-1} = \sum_n (I + \langle t_n \rangle G^{r,0})^{-1} \langle t_n \rangle.\tag{3.44}$$

Ce dernier peut aussi être exprimé, en utilisant les propriétés d'inversion des matrices, comme

$$\langle T \rangle (I + G^{r,0} \langle T \rangle)^{-1} = \sum_n \langle t_n \rangle (I + G^{r,0} \langle t_n \rangle)^{-1}.\tag{3.45}$$

L'équation (3.28) devient donc, dans la CPA,

$$H_{eff} = P + \sum_n \langle t_n \rangle (I + G^{r,0} \langle t_n \rangle)^{-1}.\tag{3.46}$$

La nouvelle condition pour obtenir $H_{eff} = P$ s'énonce comme

$$\langle t_n [P] \rangle = 0.\tag{3.47}$$

Ceci indique que la connaissance de l'opérateur de diffusion pour un site quelconque est suffisante pour déterminer $\langle G^r \rangle$, qui lui-même détermine les propriétés macroscopiques du système. Le calcul de t_n est en principe tout à fait réalisable et, ainsi, nous sommes en possession d'un outil théorique permettant d'étudier les systèmes désordonnés sans forte corrélation électron-électron et où l'interaction utilisée dans le calcul, v_n , est diagonale, $H - P = \sum_n v_n$.

Comme nous supposons que les éléments hors diagonaux ne sont pas affectés par le désordre et que H_{eff} conserve la symétrie de H , l'Hamiltonien P peut-être écrit, en considérant s le spin de l'électron étudié, comme

$$\begin{aligned} P &= \sum_k [\varepsilon_k + \Sigma_s(\varepsilon)] c_{k,s}^\dagger c_{k,s} \\ &= \sum_k |k, s\rangle [\varepsilon_k + \Sigma_s(\varepsilon)] \langle s, k|. \end{aligned} \tag{3.48}$$

Il faut déterminer la bonne *self-energy* $\Sigma_s(\varepsilon)$ pour obtenir $\langle t_n \rangle = 0$. Dans ce cas précis, toute l'information sur le désordre est donc contenue dans $\Sigma_s(\varepsilon)$.

3.4 Modèle des liaisons fortes (TB)

La méthode des liaisons fortes suppose l'utilisation d'une base de fonctions propres de type atomique (localisées autour de la position d'équilibre d'un atome). Nous pouvons, pour chaque site atomique, prendre autant de ces fonctions que nous le désirons. Le plus simple traitement possible est de supposer qu'il n'y a qu'une seule orbitale par site et que le chevauchement de celles-ci se limite aux plus proches voisins. Dans ce cas, l'énergie (relation de dispersion) peut être exprimée en fonction de k et prend la forme

$$\varepsilon_k = \pm t \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}, \tag{3.49}$$

où t représente l'amplitude du chevauchement entre deux sites voisins et \mathbf{R}_l le vecteur distance.

Les fonctions d'ondes dans l'espace k sont quant à elles exprimées par

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} |m\rangle, \quad (3.50)$$

où les *ket* $|m\rangle$ sont des orbitales atomiques.

Si le réseau est un hypercube en d dimensions avec un paramètre de maille a , la relation de dispersion est

$$\varepsilon_k = \pm 2t \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_\alpha a). \quad (3.51)$$

La largeur de bande $2W$ est définie comme la différence en énergie entre le minimum et le maximum de la relation de dispersion. Par exemple, pour (3.51), $W = 2t$ pour $d = 1$, $W = 4t$ pour $d = 2$ et $W = 6t$ pour $d = 3$.

Puisque dans le modèle des liaisons fortes nous considérons un ensemble de fonctions propres, chacune localisée autour d'un site particulier, celui-ci s'applique tout naturellement à la CPA (voir l'équation (3.30)) et c'est pourquoi il est utilisé ici.

Pour le calcul de la CPA, il faut connaître l'expression de la fonction de Green diagonale dans l'espace, $G_{mm}^{r,0}(\varepsilon)$.

$$\begin{aligned} G_{mm}^{r,0}(\varepsilon) &= \sum_k \frac{\langle m|k\rangle \langle k|m\rangle}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\epsilon} \\ &= \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1ZB} \frac{d\mathbf{k}}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\epsilon} \end{aligned} \quad (3.52)$$

Comme un modèle à une bande ne peut être qu'une description qualitative de la réalité, l'utilisation d'approximations simples, qui n'induisent qu'une perte de la précision au niveau quantitatif pour (3.52) avec (3.51) comme relation de dispersion, permettrait des calculs beaucoup plus rapides sans altérer la valeur des résultats. L'idée est de construire une densité d'états simple, qui conserve les bonnes propriétés aux bords de bande. Nous pouvons ensuite obtenir la fonction de Green en utilisant la troisième relation de (3.20). Nous appelons ces densités d'états «densité d'états non-perturbée» $D_0(\varepsilon)$, car ce sont celles que nous obtenons pour une maille parfaitement périodique, sans désordre.

Pour deux et trois dimensions, il est possible d'adopter l'approche suivante :

a) 2D : La vraie densité d'états dans ce cas est :

$$D_0(\varepsilon) = \frac{2}{W\pi^2} \Theta(W - |\varepsilon|) \mathbf{K} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{W}\right)^2} \right), \quad (3.53)$$

où Θ est la fonction de Heaviside et $\mathbf{K}(x)$ est l'intégrale elliptique complète de première espèce qui s'exprime comme

$$\mathbf{K}(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2(\alpha)}} \quad (3.54)$$

Cette densité d'états présente des discontinuités aux deux bords de bande, ainsi qu'une singularité à $\frac{\varepsilon}{W} = 0$. Les singularités de la fonction de Green sont associées avec des points de selle dans ε_k et elles sont connues en physique de la matière condensée sous le nom de singularités de Van-Hove.

Comme les détails quantitatifs ne sont pas très importants, nous pouvons approximer la densité d'états 2D par une fonction simple, présentant le bon comportement analytique près des bords de bande donnant un état par site.

Cette relation est (Economu, 1983)

$$D_0^{2D}(\varepsilon) = \frac{1}{2W} \Theta(W - |\varepsilon|). \quad (3.55)$$

La fonction de Green correspondante est

$$WG_{mm}^{r,0}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\varepsilon' + 1}{\varepsilon' - 1} \right), \quad (3.56)$$

où $\varepsilon' \equiv \frac{\varepsilon}{W}$.

b) 3D : Dans le cas 3D, il n'y a pas d'expression analytique de la densité d'états.

La fonction de Green, quant à elle, s'exprime comme

$$G_{mm}^{r,0}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_0^\pi d\phi x \mathbf{K}(x), \quad (3.57)$$

où $\mathbf{K}(x)$ est l'intégrale elliptique complète de première espèce avec

$$x = \frac{4t}{\varepsilon + i\epsilon \mp 2t \cos(\phi)}. \quad (3.58)$$

La partie imaginaire donnant la densité d'états peut être calculée numériquement. La densité d'états approche zéro près des bords de bande de façon continue en suivant le comportement $\sqrt{|\Delta\varepsilon|}$, où $|\Delta\varepsilon|$ est la différence entre ε et le bord de bande correspondant. Il y a aussi deux singularités de Van Hove.

L'approximation présentant le bon comportement aux bords de bande est de supposer une densité d'états semi-circulaire (Economu, 1983),

$$D_0^{3D}(\varepsilon) = \frac{2\Theta(W - |\varepsilon|)}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - \varepsilon^2}. \quad (3.59)$$

La fonction de Green correspondant à cette densité d'états peut s'écrire sous

plusieurs formes, mais est habituellement présentée dans la littérature (Economu, 1983; Jones et March (b), 1973) comme

$$G_{mm}^{r,0}(\varepsilon) = \frac{2}{z + \sqrt{z^2 - W^2}} \quad (3.60)$$

ou

$$G_{mm}^{r,0}(\varepsilon) = \frac{2}{W^2} \left(z - \sqrt{z^2 - W^2} \right) \quad (3.61)$$

et porte le nom de fonction de Green de Hubbard. Notons qu'à partir de maintenant, seule la deuxième forme (3.61) sera utilisée, puisque l'autre est problématique pour les logiciels et langages informatiques traitant les nombres complexes.

Comme discuté pour (3.48), notre problème particulier dépend du spin. Les expressions précédentes doivent donc comporter une spécification quant au spin s et, ainsi, nous pouvons écrire, pour le cas parfaitement périodique

$$z'_s = \varepsilon' + i\epsilon \quad (3.62)$$

et pour le cas avec désordre traité à l'aide de la CPA

$$z'_s = \varepsilon' - \Sigma'_s(\varepsilon') + i\epsilon. \quad (3.63)$$

Nous disposons maintenant de formulations pour la fonction de Green entrant de le calcul de t_n (3.36).

3.5 Formule quantique générale pour la conductivité

Bien que la dérivation des équations suivantes (Kubo, 1956; Kubo, 1957) soit bien connue et amplement citée, nous refaisons dans l'Annexe I la dérivation complète,

pour le bénéfice du lecteur. Dans cette annexe, en premier lieu, la formule générale pour le problème à N-corps est obtenue. Ensuite, la formule est réécrite pour le cas d'un Hamiltonien à une particule.

La théorie de la réponse linéaire de Kubo-Greenwood est une approche totalement quantique, qui s'applique à un système soumis à un champ électrique AC ou DC de faible intensité, c'est-à-dire dans le régime d'applicabilité de la loi d'Ohm, où la dépendance en champ électrique du courant d'ordre supérieur à un est négligeable. Si le champ électrique varie dans le temps à une fréquence ω , les éléments du tenseur de conductivité s'expriment comme

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \Omega \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\omega t + \eta t} \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda \text{Tr} \left\{ \hat{J}_\mu(0) \hat{\rho}_0 \hat{J}_\nu(t - i\hbar\lambda) \right\}, \quad (3.64)$$

où μ et ν représentent des directions spatiales, Ω est le volume, \hat{J} est l'opérateur courant et $\hat{\rho}_0$ est la matrice densité sans le champ électrique. Cette formulation est correcte, peu importe l'Hamiltonien choisi. La CPA exigeant un Hamiltonien à une particule, nous écrivons la conductivité pour ce cas. Si $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ sont deux états propres quelconques du système sans champ électrique, la conductivité devient

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{i\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle \alpha | \hat{V}_\mu | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_\nu | \alpha \rangle}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\delta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}, \quad (3.65)$$

où \hat{V} est l'opérateur vitesse et $f(\varepsilon)$ est la fonction de Fermi-Dirac. Nous remarquons que, dans cette approche, tous les états possibles du système participent au calcul du transport.

Nous pouvons aussi montrer (Jones et March (b), 1973) que la formule de Kubo-

Greenwood a les deux particularités suivantes :

$$\begin{aligned}\sigma_{\mu\nu}^*(\omega, B^0) &= \sigma_{\mu\nu}(-\omega, B^0) \\ \sigma_{\mu\nu}(\omega, B^0) &= \sigma_{\nu\mu}(\omega, -B^0).\end{aligned}\tag{3.66}$$

Pour les calculs, nous avons besoin de la partie réelle de la conductivité, que nous exprimons pour σ_{xy} , à l'aide de (3.66), comme

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}\{\sigma_{xy}(\omega, B^0)\} &= \frac{\sigma_{xy}(\omega, B^0) + \sigma_{xy}^*(\omega, B^0)}{2} \\ &= \frac{\sigma_{xy}(\omega, B^0) + \sigma_{yx}^*(\omega, -B^0)}{2}.\end{aligned}\tag{3.67}$$

L'effet Hall caractérisant la partie linéaire en champ magnétique du transport, la conductivité xy utilisée est limitée à cette dépendance d'ordre un ($\sigma_{xy} \equiv Bf$), donc $\sigma_{xy}(\omega, -B^0) = -\sigma_{xy}(\omega, B^0)$. Nous pouvons écrire (3.67)

$$\operatorname{Re}\{\sigma_{xy}(\omega, B^0)\} = \frac{\sigma_{xy}(\omega, B^0) - \sigma_{yx}^*(\omega, B^0)}{2}.\tag{3.68}$$

En utilisant (3.66) encore une fois, (3.68) s'écrit aussi comme

$$\operatorname{Re}\{\sigma_{xy}(\omega, B)\} = \frac{\sigma_{xy}(\omega, B) - \sigma_{xy}^*(-\omega, -B)}{2},\tag{3.69}$$

ce qui montre que (3.68) est une fonction antisymétrique. Par soucis de rendre la notation moins lourde, redéfinissons

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}\{\sigma_{xy}(\omega, B)\} &\equiv \sigma_{xy}^a(\omega, B) \\ \operatorname{Re}\{\sigma_{xx}(\omega, B)\} &\equiv \sigma_{xx}^R(\omega, B),\end{aligned}\tag{3.70}$$

où a est pour antisymétrique et R pour réel. L'équation (16) devient alors

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}^a(B_z)}{B_z [\sigma_{xx}^R(B_z)]^2}.\tag{3.71}$$

Nous avons maintenant tous les outils nécessaires pour construire un modèle minimal pour les semi-conducteurs magnétiques et pour étudier les propriétés, en particulier celles de transport. Le chapitre suivant s'applique à expliquer ce modèle et à développer les formules de la conductivité pour celui-ci.

CHAPITRE 4

DÉVELOPPEMENT DU MODÈLE

Dans ce chapitre, en utilisant le formalisme de la seconde quantification, nous présentons le modèle développé dans le but de décrire les propriétés du transport électronique des semi-conducteurs magnétiques dilués. Premièrement, l'Hamiltonien est développé, ensuite les parties réelles de la conductivité longitudinale et hors diagonale dans l'approche TB sont détaillées. Par la suite, les coefficients du transport sont réécrits étant donné la structure périodique choisie pour le cristal sans impuretés. La forme de la CPA que nous avons choisi pour traiter l'Hamiltonien est présentée, suivie, finalement, de la formule donnant l'énergie autour de laquelle, les états accessibles aux porteurs sont dues aux impuretés magnétiques, à $T = 0$.

4.1 Hamiltonien choisi

Le magnéto-transport étant le sujet de ce travail, il est évident que l'effet de l'application d'un champ magnétique externe doit être pris en compte dans le modèle et il est nécessaire d'inclure une forme d'interaction spin-orbite, laquelle est la clé des propriétés non usuelles de l'effet Hall. Considérer ces deux éléments et l'interaction de spin sur une base totalement quantique est distinctif de notre approche.

Développons ici, terme à terme, l'Hamiltonien qui sera utilisé pour les calculs. Comme discuté précédemment, nous cherchons à décrire un trou p se déplaçant de site en site dans une maille périodique, mais dont la nature d'un atome sur un site

particulier est aléatoire. L'Hamiltonien total en représentation des liaisons fortes est composé de 7 termes.

$$H_{tot} = H_p + H_{Loc} + H_d + H_{pd} + H_{p-B} + H_{d-B} + H_{so} \quad (4.1)$$

Le premier terme est celui de l'énergie cinétique, qui décrit comment le trou se déplace dans le cristal périodique sous un champ magnétique. Son expression est, en spécifiant le spin par s ,

$$H_p = \sum_{m,n} t_{mn} c_{m,s}^\dagger c_{n,s}, \quad (4.2)$$

où t_{mn} est l'intégrale de saut décrivant le recouvrement des orbitales aux sites m et n . Dans le modèle des liaisons fortes, nous pouvons montrer (Böttger et Bryskin, 1985) que la présence d'un champ magnétique ajoute une phase à l'intégrale de saut qui s'écrit, dans le système international d'unités,

$$t_{mn} = t_{mn}^0 e^{\frac{-ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_n \times \mathbf{R}_m)}, \quad (4.3)$$

où t_{mn}^0 est l'intégrale de saut pour un système sans champ magnétique.

Le deuxième terme de l'Hamiltonien décrit le potentiel atomique que le trou ressent lorsqu'il est sur un site.

$$H_{Loc} = \sum_m E_\alpha c_{m,s}^\dagger c_{m,s}, \quad (4.4)$$

où α représente soit M ou NM , dépendamment s'il y a un ion magnétique ou non au site m . La quantité E_α est un potentiel sans dépendance avec le spin qui opère seulement sur le site. Une variable locale est employée, quoique le vrai potentiel est celui de Coulomb écranté. Nous y sommes forcés, car une théorie où les interactions sont locales comme la CPA ne permet pas de traiter l'interaction de Coulomb pour

un porteur se situant entre deux sites.

Le troisième terme de l'Hamiltonien modélise l'interaction ferromagnétique entre les différents spins localisés du matériau. Un échange direct est utilisé et N_S est le nombre de sites contenant un atome magnétique.

$$H_d = - \sum_{[m,n] \in \{N_S\}} J_{m,n} \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n \quad (4.5)$$

Dans les semi-conducteurs magnétiques dilués, les différentes impuretés devraient se situer en moyenne assez loin les unes des autres, rendant la contribution de l'échange direct négligeable : $J_{m,n} = 0 \rightarrow H_d = 0$.

Le terme suivant de l'Hamiltonien est responsable du magnétisme et montre comment les trous mobiles vont interagir avec les électrons d localisés. Les trous se couplent de façon antiferromagnétique avec des spins locaux traités quantiquement, c'est-à-dire pouvant prendre $2S + 1$ valeurs. Cette interaction découle de l'interaction de Coulomb, voir par exemple (Majlis, 2000). L'interaction de spin s'écrit

$$H_{pd} = \frac{J_{pd}}{2} \sum_{m \in \{N_S\}} c_{m,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S}_m c_{m,s'}, \quad (4.6)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_{ss'} = [\sigma_{ss'}^x, \sigma_{ss'}^y, \sigma_{ss'}^z]$ est le vecteur des matrices de Pauli et \mathbf{S} est l'opérateur de spin des ions Mn.

Ce terme est très riche, dépendamment de l'amplitude de J_{pd} . Par exemple, l'effet RKKY que nous avons rejeté comme explication du magnétisme dans les DMS en découle. En effet, si nous avons un gaz électronique contenant un très grand nombre de particules et que nous ajoutons dans le système quelque spins localisés, ceux-ci peuvent être considérés comme étant une petite perturbation. La constante

d'échange J_{pd} est dans ce cas très faible et le terme (4.6) peut être traité par la théorie des perturbations jusqu'à l'ordre deux. Un facteur d'échange effectif J_{eff} entre deux moments localisés \mathbf{S}_n et \mathbf{S}_m changeant de signe en fonction de la distance est obtenu par cette méthode. Par contre, dans les DMS, il y a au mieux (si tous les Mn donnent un porteur ou s'il n'y a pas de compensation) autant de charges que de spins localisés, ce qui ne représente certainement pas une perturbation du gaz électronique. Notons aussi que le terme (4.6) est isotrope. En principe, le théorème de Mermin-Wagner nous dit que cet Hamiltonien, si nous le considérons en 2D, ne peut prédire d'aimantation spontanée. Ceci est vrai pour une solution exacte, mais la CPA est ici utilisée, c'est-à-dire que les propriétés sont calculées à partir d'un seul site plongé dans un milieu effectif. La valeur moyenne de S^z obtenue pour ce site seul est considérée être la valeur pour le matériau en entier. Il n'y a donc aucune raison pour que le spin moyen soit toujours nul dans ce champ effectif d'alliage. Il est donc possible d'avoir une aimantation en 2D avec un Hamiltonien isotrope, car nous le solutionnons de manière approximative.

Les deux termes suivants de l'Hamiltonien représentent respectivement l'interaction des trous (terme de Zeeman) et des spins localisés avec un champ magnétique. Le premier s'écrit

$$H_{p-B} = -\frac{g^*}{2}\mu_B \sum_m B_m c_{m,s}^\dagger \sigma_{ss}^z c_{m,s}, \quad (4.7)$$

où g^* est le facteur de Landé effectif (puisque nous ne sommes pas dans le vide) et $B_m = B_z^0$ représente le champ magnétique externe, lequel définit la direction \hat{z} , tandis que le deuxième est

$$H_{d-B} = -2\mu_B \sum_{m \in \{N_s\}} B_m S_m^z. \quad (4.8)$$

Enfin, le dernier terme de l'Hamiltonien décrit l'interaction spin-orbite intrinsèque entre le spin des trous et leur moment cinétique orbital, qui peut s'écrire comme

$$H_{so} = \sum_{m,n} \langle s, m | h_{so} | n, s' \rangle c_{m,s}^\dagger c_{n,s'}, \quad (4.9)$$

où h_{so} est l'opérateur spin-orbite usuel (voir par exemple (Elliot, 2000)).

Ce terme semble à première vue très complexe, mais Movaghar et Cochrane (Movaghar et Cochrane (a), 1991) ont montré que la partie dominante a la forme d'une phase qui peut être incorporée dans la définition de l'induction magnétique utilisée dans (4.3). L'induction s'écrira ainsi

$$\mathbf{B} = (B_z^0 + B_{so})\hat{z} \equiv B\hat{z}. \quad (4.10)$$

La contribution de l'effet spin-orbite est (Movaghar et Cochrane (a), 1991)

$$B_{so} = 2 \left(\frac{mt}{e\hbar} \right) (2 - g^*) \langle s^z \rangle, \quad (4.11)$$

avec $\langle s^z \rangle$ la polarisation des trous et $(2 - g^*)$ la différence entre le facteur de Landé du vide et celui du milieu considéré. En ne conservant que la partie dominante de H_{so} , H_p et H_{so} peuvent être fusionnés dans un seul terme, H_{p+so} . L'Hamiltonien total (4.1) contient, considérant (4.10), un seul terme non diagonal ayant la forme de (4.2). Nous négligeons dans l'Hamiltonien l'effet spin-autre-orbite discuté dans l'introduction. Prenant place seulement sur les sites avec une impureté magnétique, nous devrions inclure un désordre hors diagonal pour en tenir compte. Ce type de désordre ne peut généralement être traité dans la CPA. Nous nous limitons donc à étudier la conséquence de l'effet spin-orbite intrinsèque sur le transport. Celui-ci pourrait bien être dominant, comme le pensent Jungwirth *et al.* (Jungwirth *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003). Il serait tout de même intéressant de tenter d'inclure

l'interaction spin-orbite provenant des impuretés dans une étude subséquente pour permettre de bien comparer l'importance relative des deux mécanismes.

4.2 Parties réelles de la conductivité longitudinale et hors diagonale

Comme l'Hamiltonien décrivant notre modèle (équation (4.1)) est de type liaisons fortes avec un seul terme hors diagonal, nous devons écrire les expressions pour les coefficients du transport en considérant cette forme d'Hamiltonien.

Les opérateurs position nécessaires s'écrivent en liaisons fortes comme

$$\begin{aligned} x_s &= \sum_m R_m^x c_{m,s}^\dagger c_{m,s} \\ y_s &= \sum_m R_m^y c_{m,s}^\dagger c_{m,s}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Sachant comment calculer l'opérateur vitesse (voir Annexe I), nous obtenons

$$\hat{V}_\mu^s = -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} (\mathbf{R}_n^\mu - \mathbf{R}_m^\mu) t_{mn} c_{m,s}^\dagger c_{n,s}. \quad (4.13)$$

Cette dernière expression peut ensuite être insérée dans la formule de Kubo à un électron (3.65) et seule la dépendance linéaire en champ magnétique est conservée pour la partie hors diagonale du tenseur de conductivité. Pour la partie longitudinale, seul le terme indépendant du champ est considéré, le reste n'étant qu'une très faible correction, n'affectant que très peu σ_{xx} . Il est aussi à noter qu'il ne faut pas oublier d'effectuer la moyenne sur toutes les configurations pour obtenir une solution comparable avec l'expérience.

Les formulations utilisées pour σ_{xx} et σ_{xy} ne sont pas nouvelles, mais leurs dérivations

est un travail de longue haleine (voir (Matsubara et Kaneyoshi, 1968) pour la dérivation de σ_{xy} la plus agée à notre connaissance). Pour bien saisir la physique derrière les éléments du tenseur de conductivité, il est important de bien comprendre comment ils sont obtenus. Dans cette optique, l'Annexe II présente le calcul complet de ces équations.

Nous obtenons, en négligeant les corrections de vertex, ce qui revient à faire découplage suivant par rapport à la moyenne sur toutes les configurations du produit de deux fonctions de Green : $\langle GG \rangle = \langle G \rangle \langle G \rangle$,

$$\langle \sigma_{xx}^{R,s}(\omega = 0) \rangle = \frac{\hbar e^2}{\pi \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_k V_x^2 \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon_k) \rangle \} \right]^2 \quad (4.14)$$

et

$$\langle \sigma_{xy}^{a,s}(\omega = 0) \rangle = \frac{2e^3 \hbar^2 B}{3\pi \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_k \Gamma_{xy}(k) \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon_k) \rangle \} \right]^3, \quad (4.15)$$

où ε_k est la relation de dispersion obtenue avec t_{mn}^0 ,

$$\begin{aligned} \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon_k) \rangle &= \frac{1}{E - \varepsilon_k - \Sigma_s} \\ \Sigma_s &= \Sigma_{s[R]} - i\Sigma_{s[I]} \end{aligned} \quad (4.16)$$

est la fonction de Green obtenue avec la CPA en ne considérant pas le champ magnétique et l'interaction spin-orbite dans l'intégrale de recouvrement et

$$\Gamma_{xy}(k) = \frac{V_x^2}{M_{yy}} + \frac{V_y^2}{M_{xx}} - 2 \frac{V_x V_y}{M_{xy}} \quad (4.17)$$

avec

$$\begin{aligned} V_\mu &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_\mu} \\ M_{\mu\nu}^{-1} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_\mu \partial k_\nu}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

4.3 Éléments du tenseur de conductivité pour un hypercube simple

Par soucis de simplicité, nous adoptons dans nos calculs l'hypothèse que la maille élémentaire du cristal non dopé est un hypercube simple. Considérant cette maille, Edwards *et al.* (Edwards *et al.*, 1999) ainsi que Auslender et Kogan (Auslender et Kogan, 2001) sont capables d'effectuer la sommation sur k dans l'expression la conductivité longitudinale (4.14), mais ils ne donnent que peu ou pas de détails sur la procédure. Dans cette sous-section, nous décrivons une méthode particulière pour obtenir leur solution et nous développons ensuite, de façon analogue, une équation pour σ_{xy}^a , ce qui n'a pas encore été fait à notre connaissance.

4.3.1 Conductivité longitudinale

Nous pouvons réécrire la conductivité (4.14) de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{\alpha\alpha}^{R,s}(\omega = 0) \rangle &= \frac{e^2 \hbar}{\pi \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int d\varepsilon \sum_k V_\alpha^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^2 \\ &= \frac{e^2 \hbar}{\pi v} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int d\varepsilon \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^2 \frac{1}{N} \sum_k V_\alpha^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \end{aligned} \quad (4.19)$$

où $\Omega \equiv vN$ et α est la direction spatiale x, y ou z .

Si nous posons

$$X(\varepsilon) \equiv \frac{1}{N} \sum_k V_\alpha^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (4.20)$$

la conductivité prend la forme

$$\langle \sigma_{\alpha\alpha}^{R,s}(\omega = 0) \rangle = \frac{e^2 \hbar}{\pi v} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int d\varepsilon X(\varepsilon) \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^2. \quad (4.21)$$

L'objectif est d'obtenir une forme pour $X(\varepsilon)$ où la sommation sur le vecteur k n'apparaît plus. Pour ce faire, nous allons supposer que le cristal parfait est un réseau hypercubique en d dimensions décrit par une relation de dispersion TB plus proches voisins, soit

$$\varepsilon_k = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_\alpha a), \quad (4.22)$$

avec $v = a^d$.

Dans ce cas, (4.20) s'écrit

$$X(\varepsilon) = \frac{a^2 (2t)^2}{N \hbar^2} \sum_k \sin^2(k_\alpha a) \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (4.23)$$

Prenons maintenant la transformée de Fourier de cette fonction, que nous appellons $\phi(w)$.

$$\phi(w) = \int_{-\infty}^{\infty} X(\varepsilon) e^{-i w \varepsilon} d\varepsilon \quad (4.24)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\phi(w) &= \frac{a^2(2t)^2}{N\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_k \sin^2(k_\alpha a) \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{-iw\varepsilon} d\varepsilon \\
&= \frac{a^2(2t)^2}{N\hbar^2} \sum_k \sin^2(k_\alpha a) e^{-iw\varepsilon_k} \\
&= \frac{a^2(2t)^2}{N\hbar^2} \sum_k \sin^2(k_\alpha a) e^{i2tw \sum_{\alpha=1}^d \cos(k_\alpha a)} \\
&= \frac{a^2(2t)^2}{N\hbar^2} \sum_k \sin^2(k_\alpha a) \prod_{\alpha=1}^d e^{i2tw \cos(k_\alpha a)} \\
&= \frac{a^2(2t)^2 N a^d}{N\hbar^2} \left[\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi} e^{i2tw \cos ka} \right]^{d-1} \left[\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{2\pi} \sin^2(ka) e^{i2tw \cos ka} \right] \\
&= \frac{a^2(2t)^2}{\hbar^2} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{i2tw \cos x} \right]^{d-1} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{2\pi} \sin^2(x) e^{i2tw \cos x} \right] \\
&\equiv \frac{a^2(2t)^2}{\hbar^2} [I_1(w)]^{d-1} I_2(w).
\end{aligned} \tag{4.25}$$

En utilisant les expressions suivantes par rapport aux fonctions de Bessel

a)

$$J_0(s) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{is \cos(\theta)} d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi e^{is \cos(\theta)} d\theta \tag{4.26}$$

b)

$$J_1(s) = \frac{s}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi e^{is \cos(\theta)} \sin^2(\theta) d\theta, \tag{4.27}$$

nous pouvons écrire $\phi(w)$ comme

$$\phi(w) = \frac{a^2(2t)^2}{\hbar^2} [J_0(2tw)]^{d-1} \left[\frac{1}{2tw} J_1(2tw) \right]. \tag{4.28}$$

Nous obtenons ainsi (4.20) en faisant la transformée de Fourier inverse

$$\begin{aligned}
X(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(w) e^{iw\varepsilon} dw \\
&= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{a^2(2t)^2}{\hbar^2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} [J_0(2tw)]^{d-1} \left[\frac{1}{2tw} J_1(2tw) \right] e^{iw\varepsilon} dw.
\end{aligned} \tag{4.29}$$

À première vue, l'expression précédente est complexe, mais il est possible de la transformer de telle façon que nous pouvons la résoudre analytiquement.

Remarquons premièrement qu'avec $dJ_0(s)/ds = -J_1(s)$,

$$\frac{d[J_0(2tw)]^d}{dw} = -2td[J_0(2tw)]^{d-1}J_1(2tw). \quad (4.30)$$

Utilisant ceci dans (4.29)

$$\begin{aligned} X(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{a^2(2t)^2}{\hbar^2} \right] \left[-\frac{1}{(2t)^2 d} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w} \frac{d[J_0(2tw)]^d}{dw} e^{iw\varepsilon} dw \\ &= - \left[\frac{a^2}{d\hbar^2} \right] \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left[\frac{1}{w} \right]}_{\Im(F(\varepsilon))} \underbrace{\left[\frac{d[J_0(2tw)]^d}{dw} \right]}_{\Im(G(\varepsilon))} e^{iw\varepsilon} dw \\ &= - \left[\frac{a^2}{d\hbar^2} \right] \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Im(F(\varepsilon)) \Im(G(\varepsilon)) e^{iw\varepsilon} dw. \end{aligned} \quad (4.31)$$

L'équation précédente contient directement la définition de la convolution et donc

$$\begin{aligned} X(\varepsilon) &= \left[\frac{-a^2}{d\hbar^2} \right] F(\varepsilon) * G(\varepsilon) \\ &= \left[\frac{-a^2}{d\hbar^2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} F(\varepsilon - z) G(z) dz, \end{aligned} \quad (4.32)$$

où

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iw\varepsilon} \frac{1}{w} \\ G(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iw\varepsilon} \frac{d[J_0(2tw)]^d}{dw}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Utilisons la relation donnant la transformée de Fourier inverse d'une dérivée :

$$\begin{aligned}\mathfrak{F}^{-1}(f(w)') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(w)' e^{iw\varepsilon} dw \\ &= -i\varepsilon \mathfrak{F}^{-1}(f(w)).\end{aligned}\tag{4.34}$$

La fonction $G(\varepsilon)$ devient

$$\begin{aligned}G(\varepsilon) &= -i\varepsilon \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{iw\varepsilon} [J_0(2tw)]^d \\ &= -i\varepsilon \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{iw\varepsilon} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx e^{i2tw \cos(x)} \right]^d \\ &= -i\varepsilon \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{iw\varepsilon} \frac{1}{N} \sum_k e^{-iw\varepsilon_k} \\ &= -i\varepsilon \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{iw(\varepsilon - \varepsilon_k)} \\ &= -i\varepsilon \frac{1}{N} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \\ &= -i\varepsilon D_0(\varepsilon),\end{aligned}\tag{4.35}$$

où $D_0(\varepsilon)$ est la densité d'états du cristal non-dopé.

Quant à elle, $F(\varepsilon)$ est

$$F(\varepsilon) = \frac{i}{2} [\Theta(\varepsilon) - \Theta(-\varepsilon)],\tag{4.36}$$

où $\Theta(\varepsilon)$ est la fonction échelon.

$$\Theta(\varepsilon) - \Theta(-\varepsilon) = \begin{cases} -1 & -\infty < \varepsilon < 0 \\ 1 & 0 < \varepsilon < \infty \end{cases}\tag{4.37}$$

Remplaçons $F(\varepsilon)$ et $G(\varepsilon)$ dans (4.32).

$$\begin{aligned}
 X(\varepsilon) &= \left[\frac{-a^2}{d\hbar^2} \right] (-i\varepsilon D_0(\varepsilon)) * \left(\frac{i}{2} [\theta(\varepsilon) - \theta(-\varepsilon)] \right) \\
 &= \left[\frac{-a^2}{2d\hbar^2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} z D_0(z) [\theta(\varepsilon - z) - \theta(-\varepsilon + z)] dz \\
 &= \left[\frac{-a^2}{2d\hbar^2} \right] \left(\int_{-\infty}^{\varepsilon} z D_0(z) dz - \int_{\varepsilon}^{\infty} z D_0(z) dz \right)
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

La relation de dispersion (4.22) donne une densité d'états $D_0(\varepsilon)$ paire $\rightarrow D_0(\varepsilon) = D_0(-\varepsilon)$. Ainsi, $\int_{-\infty}^{\varepsilon} z D_0(z) dz + \int_{\varepsilon}^{\infty} z D_0(z) dz = 0$. Nous obtenons finalement l'expression recherchée pour $X(\varepsilon)$ qui dépend seulement de la densité d'états du cristal parfait.

$$X(\varepsilon) = \left[\frac{-a^2}{d\hbar^2} \right] \int_{-\infty}^{\varepsilon} z D_0(z) dz \tag{4.39}$$

En utilisant ce $X(\varepsilon)$, l'équation (4.21) peut être écrite sous sa forme finale :

$$\langle \sigma_{\alpha\alpha}^{R,s} \rangle = \frac{e^2}{d\pi\hbar a^{d-2}} \left[\underbrace{\int \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right)}_{\text{Température}} \underbrace{\int \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^2}_{\text{Désordre}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\varepsilon} -z D_0(z) dz d\varepsilon dE}_{\text{Cristal}} \right]. \tag{4.40}$$

Cette formulation est très élégante, car elle sépare l'expression en fonction des contributions individuelles des différentes caractéristiques du système. La première intégrale à partir de la droite représente l'apport de la partie périodique du cristal, alors que la deuxième décrit l'apport du désordre (i.e. les impuretés) et enfin, la troisième nous donne l'influence de la température. Cette expression est bien la même que (Edwards *et al.*, 1999) et (Auslender et Kogan, 2001). En adoptant la même approche, nous allons maintenant montrer que nous pouvons obtenir une expression pour la partie antisymétrique de σ_{xy} , séparée elle aussi en trois intégrales montrant la contribution de la topologie, du désordre et de la température.

4.3.2 Conductivité de Hall

Si nous appliquons la même démarche que pour la section précédente, nous obtenons, pour l'équation (4.15)

$$\langle \sigma_{xy}^{a,s}(\omega = 0) \rangle = \frac{2e^3 \hbar^2 B}{3\pi a^d} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int d\varepsilon Y(\varepsilon) \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^3 \quad (4.41)$$

avec

$$Y(\varepsilon) \equiv \frac{1}{N} \sum_k \left[\frac{V_x^2}{M_{yy}} + \frac{V_y^2}{M_{xx}} - \frac{2V_x V_y}{M_{xy}} \right] \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (4.42)$$

Encore une fois, la relation de dispersion (4.22) est utilisée et $Y(\varepsilon)$ prend la forme

$$\begin{aligned} Y(\varepsilon) &= \frac{1}{N} \frac{(2t)^3 a^4}{\hbar^4} \sum_k [\sin^2(k_x a) \cos(k_y a) + \sin^2(k_y a) \cos(k_x a)] \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \\ &= 2 \frac{1}{N} \frac{(2t)^3 a^4}{\hbar^4} \sum_k \sin^2(k_x a) \cos(k_y a) \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Comme précédemment, effectuons la transformée de Fourier

$$\begin{aligned} \varsigma(w) &= \int_{-\infty}^{-\infty} X(\varepsilon) e^{-i w \varepsilon} d\varepsilon \\ &= \frac{2(2t)^3 a^4}{N \hbar^4} \sum_k \sin^2(k_x a) \cos(k_y a) e^{-i w \varepsilon_k} \\ &= \frac{2(2t)^3 a^4}{N \hbar^4} \sum_k \sin^2(k_x a) \cos(k_y a) \prod_{\alpha=1}^d e^{i 2 t w \cos(k_\alpha a)} \\ &= \frac{2(2t)^3 a^4}{\hbar^4} [I_1(w)]^{d-2} I_2(w) I_3(w), \end{aligned} \quad (4.44)$$

où $I_1(w)$ et $I_2(w)$ sont définies dans (4.25) alors que $I_3(w)$ s'exprime comme

$$I_3(w) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{2\pi} \cos(x) e^{i 2 t w \cos(x)}. \quad (4.45)$$

Les deux premières intégrales ($I_1(w)$ et $I_2(w)$) sont connues du calcul de la conductivité longitudinale, alors que $I_3(w)$ correspond à une constante multiplicative près, à une des fonctions de Bessel

$$J_1(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \cos(\theta) e^{is \cos(\theta)}. \quad (4.46)$$

Finalement,

$$\varsigma(w) = \frac{2(2t)^3 a^4}{\hbar^4} i [J_0(2tw)]^{d-2} \frac{1}{2tw} [J_1(2tw)]^2. \quad (4.47)$$

Pour être en mesure de résoudre analytiquement la transformée de Fourier inverse que nous allons appliquer à $\varsigma(w)$, nous devons écrire (4.47) différemment. Pour ce faire, regardons l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 [J_0(2tw)]^d}{dw^2} &= \frac{d}{dw} [-2td [J_0(2tw)]^{d-1} J_1(2tw)] \\ &= -2td \left[-2t(d-1) [J_0(2tw)]^{d-2} [J_1(2tw)]^2 + [J_0(2tw)]^{d-1} \frac{dJ_1(2tw)}{dw} \right] \\ &= (2t)^2 d(d-1) [J_0(2tw)]^{d-2} [J_1(2tw)]^2 - (2t)^2 d [J_0(2tw)]^d \\ &\quad + \frac{2td}{w} [J_0(2tw)]^{d-1} J_1(2tw) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Il est possible d'isoler

$$\begin{aligned} [J_0(2tw)]^{d-2} [J_1(2tw)]^2 &= \frac{1}{(2t)^2 d(d-1)} \frac{d^2 [J_0(2tw)]^d}{dw^2} + \frac{1}{(d-1)} [J_0(2tw)]^d \\ &\quad - \frac{1}{2t(d-1)} \frac{1}{w} [J_0(2tw)]^{d-1} J_1(2tw) \end{aligned} \quad (4.49)$$

et nous remplaçons dans (4.47),

$$\begin{aligned} \varsigma(w) &= \frac{2a^4}{d(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{w} \frac{d^2 [J_0(2tw)]^d}{dw^2} + \frac{2(2t)^2 a^4}{(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{w} [J_0(2tw)]^d \\ &\quad - \frac{2(2t)a^4}{(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{w^2} [J_0(2tw)]^{d-1} J_1(2tw). \end{aligned} \quad (4.50)$$

La fonction $Y(\varepsilon)$ est séparée en trois termes distincts, que nous pouvons résoudre un à un. Posons $Y(\varepsilon) \equiv Y_1(\varepsilon) + Y_2(\varepsilon) + Y_3(\varepsilon)$.

a)

$$\begin{aligned} Y_1(\varepsilon) &= \frac{2a^4}{d(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w} \frac{d^2[J_0(2tw)]^d}{dw^2} e^{iw\varepsilon} dw \\ &= \frac{2a^4}{d(d-1)\hbar^4} i F(\varepsilon) * G(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.51)$$

où

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iw\varepsilon} \frac{1}{w} \quad (4.52)$$

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iw\varepsilon} \frac{d^2[J_0(2tw)]^d}{dw^2}. \quad (4.53)$$

La fonction $F(\varepsilon)$ est donnée par (4.36). Sachant que la transformée inverse d'une dérivée seconde est $\mathfrak{S}^{-1}(f(w)') = (-i\varepsilon)\mathfrak{S}^{-1}(f(w))$ et utilisant le résultat obtenu en calculant (4.35), nous obtenons $G(\varepsilon) = -\varepsilon^2 D_0(\varepsilon)$. Le résultat final sera donc

$$\begin{aligned} Y_1(\varepsilon) &= \frac{a^4}{d(d-1)\hbar^4} \left[\int_{-\infty}^{\varepsilon} z^2 D_0(z) dz - \int_{\varepsilon}^{\infty} z^2 D_0(z) dz \right] \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.54)$$

étant donné que l'intégrant est pair.

b)

$$\begin{aligned} Y_2(\varepsilon) &= \frac{2(2t)^2 a^4}{(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w} [J_0(2tw)]^d e^{iw\varepsilon} dw \\ &= \frac{2(2t)^2 a^4}{(d-1)\hbar^4} i F(\varepsilon) * G(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.55)$$

Utilisant (4.36) et (4.35)

$$Y_2(\varepsilon) = \frac{-(2t)^2 a^4}{(d-1)\hbar^4} \left[\int_{-\infty}^{\varepsilon} D_0(z) dz - \int_{\varepsilon}^{\infty} D_0(z) dz \right] = 0, \quad (4.56)$$

étant donné que $D_0(\varepsilon)$ est pair.

c)

$$\begin{aligned} Y_3(\varepsilon) &= \frac{-2(2t)a^4}{(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w^2} [J_0(2tw)]^{d-1} J_1(2tw) e^{iw\varepsilon} dw \\ &= \frac{2a^4}{d(d-1)\hbar^4} i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w^2} \frac{d[J_0(2tw)]^d}{dw} e^{iw\varepsilon} dw \\ &= \frac{2a^4}{d(d-1)\hbar^4} i F(\varepsilon) * G(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.57)$$

La fonction $G(\varepsilon)$ est la même que (4.35), alors que $F(\varepsilon)$ est

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w^2} e^{iw\varepsilon} dw \\ &= -\frac{\varepsilon}{2} [\Theta(\varepsilon) - \Theta(-\varepsilon)]. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Remplaçant ceci dans (4.57), nous obtenons

$$\begin{aligned} Y_3(\varepsilon) &= \frac{-a^4}{d(d-1)\hbar^4} \left[\int_{-\infty}^{\varepsilon} z(\varepsilon - z) D_0(z) dz - \int_{\varepsilon}^{\infty} z(\varepsilon - z) D_0(z) dz \right] \\ &= \frac{-2a^4}{d(d-1)\hbar^4} \int_{-\infty}^{\varepsilon} \varepsilon z D_0(z) dz. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Les deux premiers termes étant nuls, $Y(\varepsilon)$ est donné par

$$Y(\varepsilon) = \frac{-2a^4}{d(d-1)\hbar^4} \int_{-\infty}^{\varepsilon} \varepsilon z D_0(z) dz. \quad (4.60)$$

En utilisant ce $Y(\varepsilon)$, l'équation (4.41) peut être écrite sous sa forme finale :

$$\langle \sigma_{xy}^{a,\mu} \rangle = \frac{4e^3 B \left[\underbrace{\int \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right)}_{\text{Température}} \underbrace{\int \left[\text{Im} \{ \langle G_\mu^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^3}_{\text{Désordre}} \underbrace{\varepsilon \int_{-\infty}^{\varepsilon} -z D_0(z) dz}_{\text{Cristal}} d\varepsilon dE \right]}{3\pi d(d-1)a^{d-4}\hbar^2}. \quad (4.61)$$

Comme pour (4.40), l'expression finale montre bien les différentes contributions.

4.4 Discussion du signe devant la relation de dispersion

Avant de poursuivre, prenons quelques lignes pour discuter du choix du signe devant l'équation (4.22). Sur la Figure 4.1, nous présentons une structure de bande hypothétique d'un solide 1D.

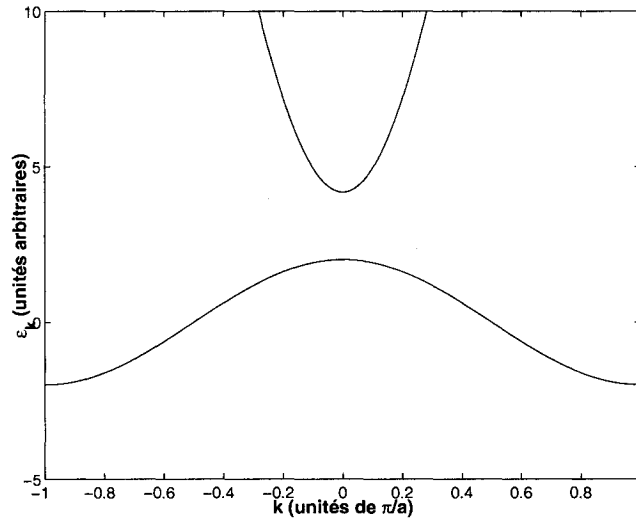


FIG. 4.1 Structure de bande d'un solide 1D

C'est l'énergie des électrons qui est représentée dans cette figure. Comme nous

nous intéressons aux trous, l'axe des ordonnées doit être inversée. Un nombre peu élevé de trous correspond à l'énergie de Fermi près du maximum alors qu'un nombre élevé correspond à l'énergie de Fermi profondément dans la bande de valence. Voilà pourquoi, du point de vu des trous, la bande est de type (4.22).

4.5 Signe du coefficient de Hall

La variation du signe du coefficient de Hall étant une question d'importance dans le domaine des matériaux désordonnés, nous nous attardons à comprendre quelles sont les prédictions de l'approche TB adoptée ici. Connaissant la *self-energy*, réécrivons l'expression du coefficient de Hall en fonction du spin à l'aide des équations que nous venons d'obtenir. En utilisant (4.40) et (4.61) dans (3.71), nous obtenons

$$R_H^s = \frac{4\pi d a^d}{3(d-1)e} \frac{B_z^0 + B_{so}}{B_z^0} \frac{\int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \Lambda_s(E)}{\left[\int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) [\Delta_\uparrow(E) + \Delta_\downarrow(E)] \right]^2}. \quad (4.62)$$

Les porteurs étant des trous, la charge e est positive ; le signe de R_H^s sera déterminé à la fois par le signe de $\frac{B_z^0 + B_{so}}{B_z^0}$ et celui de $\Lambda_s(E)$.

Réécrivons $\Lambda_s(E)$ de la façon suivante :

$$\Lambda_s(E) = \int_{-W}^W d\varepsilon h(\varepsilon) g_s(\varepsilon, E), \quad (4.63)$$

où

$$h(\varepsilon) \equiv \varepsilon \int_{-\infty}^{\varepsilon} -z D_0(z) dz \quad (4.64)$$

et

$$\begin{aligned}
 g_s(\varepsilon, E) &\equiv \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^3 \\
 &= -\frac{1}{\Sigma_{s[I]}^3} \left[\frac{1}{\left(\frac{E - \varepsilon - \Sigma_{s[R]}}{\Sigma_{s[I]}} \right)^2 + 1} \right]^3,
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

qui est une fonction strictement négative centrée à $\varepsilon = E - \Sigma_{s[R]}$.

Considérons maintenant seulement les systèmes bi et tri-dimensionnelles (évidemment, il n'y a pas d'effet Hall en 1D). Les densités d'états non perturbées s'expriment comme (3.55) et (3.59)

$$\begin{aligned}
 D_0^{2D} &= \frac{\Theta(W - |z|)}{2W} \\
 D_0^{3D} &= \frac{2\Theta(W - |z|)}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - z^2},
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

ce qui donne, en normalisant l'énergie par la demi-largeur de bande $\varepsilon' \equiv \frac{\varepsilon}{W}$,

$$\begin{aligned}
 h^{2D}(\varepsilon) &= \frac{W^2}{4} \varepsilon' (1 - \varepsilon'^2) \\
 h^{3D}(\varepsilon) &= \frac{2W^2}{3\pi} \varepsilon' (1 - \varepsilon'^2)^{\frac{3}{2}}.
 \end{aligned} \tag{4.67}$$

La fonction h a le comportement suivant :

$$h(\varepsilon) \rightarrow \begin{cases} \leq 0 & \text{si } -1 \leq \varepsilon' \leq 0 \\ \geq 0 & \text{si } 0 \leq \varepsilon' \leq 1 \end{cases} \tag{4.68}$$

La Figure 4.2 présente h (équation (4.67)) en fonction de l'énergie ε pour les cas 2D et 3D.

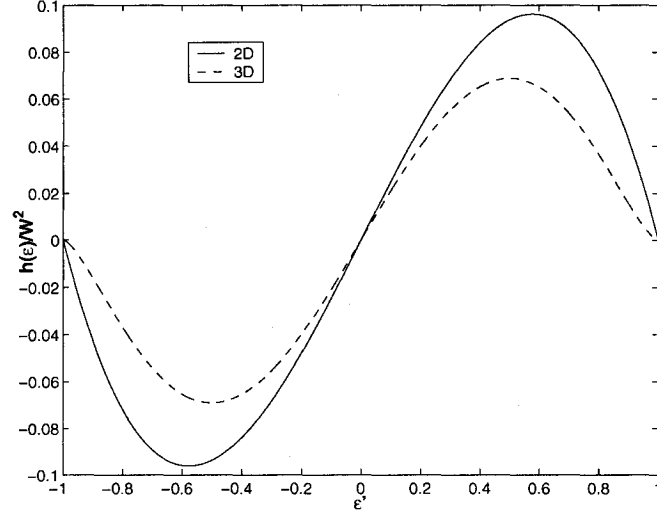


FIG. 4.2 Forme de la fonction $h(\varepsilon)$ pour deux et trois dimensions

Comme $h(\varepsilon)$ peut être positif et négatif, alors que $g_s(\varepsilon, E)$ est toujours négatif et de forme Lorentzienne, la fonction $\Lambda_s(E)$ (4.63) a le comportement suivant :

$$\Lambda_s(E) \rightarrow \begin{cases} > 0 & \text{si } E - \Sigma_{\mu[R]}(E) < 0 \\ < 0 & \text{si } E - \Sigma_{\mu[R]}(E) > 0 \end{cases} \quad (4.69)$$

Le terme contenant la dérivée de la distribution de Fermi-Dirac, $\left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right)$, étant positif et centré à l'énergie de Fermi E_f , le signe résultant du coefficient de Hall, pour une direction de spin s ,

$$R_H^s \rightarrow \begin{cases} - & \text{si } \left(\frac{B_z^0 + B_{so}}{B_z^0}\right) (E_f - \Sigma_{s[R]}(E_f)) > 0 \\ + & \text{si } \left(\frac{B_z^0 + B_{so}}{B_z^0}\right) (E_f - \Sigma_{s[R]}(E_f)) < 0, \end{cases} \quad (4.70)$$

ce qui montre que le signe dépend à la fois de la position du niveau de Fermi, du désordre (à travers la partie réelle de la *self-energy*) et du champ créé par l'effet

spin-orbite. Nous mesurons par contre expérimentalement l'effet provenant de tous les porteurs, peu importe la direction de leur spin, c'est-à-dire que nous obtenons $R_H = R_H^\uparrow + R_H^\downarrow$. Ceci indique que le signe global dépend non seulement du signe de chacune des contributions, mais aussi de leur amplitude (dans le cas où chaque direction à un signe différent, le signe du plus grand l'emportant sur l'autre).

4.6 Coefficient de Hall pour un réseau cubique simple

Dans les lignes qui suivent, nous développons l'expression complète du coefficient de Hall pour un réseau cubique simple ($d = 3$), pour lequel ont fait l'approximation d'une densité d'états semi-circulaire, dont le signe est régi par les conditions de la section précédente. Pour ce faire, les équations (4.40) et (4.61) doivent être complétées en considérant la densité d'états non perturbée donnée par (3.59). Commençons tout d'abord avec la conductivité longitudinale.

$$\langle \sigma_{xx}^{R,s}(\omega = 0) \rangle = \frac{e^2}{d\pi\hbar a^{d-2}} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \Delta_s, \quad (4.71)$$

où

$$\Delta_s \equiv \int_{-W}^W d\varepsilon L(\varepsilon) R_s(\varepsilon, E) \quad (4.72)$$

avec

$$L(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} -z D_0(z) dz = \frac{2W}{3\pi} (1 - \varepsilon'^2)^{3/2} \quad (4.73)$$

et

$$R_s(\varepsilon, E) = \left[\text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E, \varepsilon) \rangle \} \right]^2 = \frac{1}{W^2 \Sigma'_{s[I]}{}^2} \left[\frac{1}{\left(\frac{E' - \varepsilon' - \Sigma'_{s[R]}}{\Sigma'_{s[I]}} \right)^2 + 1} \right]^2. \quad (4.74)$$

Le symbole prime indique une variable normalisée par la demi-largeur de bande W .

Ceci donne

$$\begin{aligned}\langle \sigma_{xx}^{R,s} \rangle &= \frac{2e^2}{9\pi^2 \hbar a} \beta' \int dE' \frac{e^{\beta'(E'-E'_f)}}{[1 + e^{\beta'(E'-E'_f)}]^2} \int_{-1}^1 d\varepsilon' \frac{(1 - \varepsilon'^2)^{3/2}}{\Sigma_{s[I]}'^2} \left[\frac{1}{\left(\frac{E' - \varepsilon' - \Sigma'_{s[R]}}{\Sigma'_{s[I]}} \right)^2 + 1} \right]^2 \\ &\equiv \frac{2e^2}{9\pi^2 \hbar a} \beta' \Pi_s(T, B_z^0, p, x),\end{aligned}\tag{4.75}$$

où $\beta' = W/k_B T$.

Pour la conductivité de Hall, nous avons déjà calculé à la section précédente les différents termes, ce qui donne

$$\begin{aligned}\langle \sigma_{xy}^{a,s} \rangle &= -\frac{4e^3 a B}{27\pi^2 \hbar^2} \beta' \int dE' \left(-\frac{1}{\beta'} \frac{\partial f}{\partial E'} \right) \int_{-1}^1 d\varepsilon' \frac{\varepsilon' (1 - \varepsilon'^2)^{3/2}}{\Sigma_{s[I]}'^3} \left[\frac{1}{\left(\frac{E' - \varepsilon' - \Sigma'_{s[R]}}{\Sigma'_{s[I]}} \right)^2 + 1} \right]^3 \\ &\equiv -\frac{4e^3 a B}{27\pi^2 \hbar^2} \beta' \Phi_s(T, B_z^0, p, x).\end{aligned}\tag{4.76}$$

Le coefficient de Hall devient

$$\begin{aligned}R_H &= -\frac{3a^3 \pi^2 B}{e \beta' B_z^0} \frac{\Phi_{\uparrow}(T, B_z^0, p, x) + \Phi_{\downarrow}(T, B_z^0, p, x)}{[\Pi_{\uparrow}(T, B_z^0, p, x) + \Pi_{\downarrow}(T, B_z^0, p, x)]^2} \\ &\equiv -\frac{3a^3 \pi^2}{e} T' \left[\frac{B_z^0 + B'_{so}}{B_z^0} \right] \Psi(T, B_z^0, p, x),\end{aligned}\tag{4.77}$$

où $T' = k_B T/W$ et $B_z^0 = \mu_B B_z^0/W$.

Se rappelant, du Chapitre 3, que pour $d = 3$, $W = 6t$, nous obtenons pour le

champ spin-orbite

$$B'_{so} = \frac{2\mu_B \left(\frac{mt}{e\hbar}\right) (2 - g^*) \langle s^z \rangle}{6t} = \left(\frac{m\mu_B}{3e\hbar}\right) (2 - g^*) \langle s^z \rangle, \quad (4.78)$$

ce qui nous permet d'écrire

$$R_H = -\frac{3a^3\pi^2}{e} T' \Psi(T, B_z^0, p, x) \left[1 + \frac{\left(\frac{m\mu_B}{3e\hbar}\right) (2 - g^*) \langle s^z \rangle}{B'_z} \right] \left(\frac{\Omega \cdot m}{T} \right) \quad (4.79)$$

ou encore

$$\rho_H = -\frac{3a^3\pi^2}{e\mu_B} W T' \Psi(T, B_z^0, p, x) \left[B_z^0 + \left(\frac{m\mu_B}{3e\hbar}\right) (2 - g^*) \langle s^z \rangle \right] (\Omega \cdot m). \quad (4.80)$$

Ces deux expressions représentent la prédiction à partir de concepts microscopiques de l'approche quantique de Kubo pour l'effet Hall dans le cas où seul le terme dominant de l'interaction spin-orbite intrinsèque est considéré. Les équations (4.79) et (4.80) sont applicables pour tous systèmes désordonnés décrits par un Hamiltonien liaisons fortes à une bande dont le terme hors diagonal est de la forme de (4.2) avec l'influence de l'interaction spin-orbite incluse dans l'induction magnétique présente dans l'intégrale de chevauchement (4.3). Pour vérifier si le modèle décrit par l'Hamiltonien (4.1) est une explication microscopique possible du transport dans les DMS, il faut maintenant construire la CPA spécifique, qui permet de calculer la fonction $\Psi(T, B_z^0, p, x)$.

4.7 Approximation du potentiel cohérent pour le modèle considéré

Il est maintenant temps de développer la technique permettant de calculer la fonction de Green moyennée sur toutes les configurations atomiques devant être utilisée dans (4.14) et (4.15). Nous remarquons d'après ces équations que le calcul doit être

fait avec $t_{mn} = t_{mn}^0$, c'est-à-dire que nous utilisons une bande non perturbée qui ne dépend ni du champ externe, ni de l'effet spin-orbite dans sa forme. Le champ n'entre dans ce calcul que par le terme de Zeeman (diagonal), qui produit une translation énergétique de la bande. Nous présentons la matrice t_m (ne pas confondre avec t_{mn} , l'intégrale de saut) en premier lieu, pour ensuite discuter de la moyenne thermique et finir par expliciter l'algorithme du calcul.

4.7.1 Matrice t_m (opérateur de diffusion)

Comme expliqué au Chapitre 3, nous devons écrire la différence entre l'Hamiltonien H décrivant une configuration donnée et P (3.48), l'approximation de H_{eff} . H est un Hamiltonien à un électron représenté par $H_{tot} - H_{d-B}$, la partie décrivant les porteurs de (4.1). Nous pouvons ainsi écrire $H - P \equiv V$ comme

$$\begin{aligned}
 V = & \sum_m E_\alpha c_{m,s}^\dagger c_{m,s} + \frac{J_{pd}}{2} \sum_{m \in \{N_s\}} c_{m,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S}_m c_{m,s'} - \sum_k \Sigma_s c_{k,s}^\dagger c_{k,s} \\
 & - \frac{g^*}{2} \mu_B \sum_m B_m c_{m,s}^\dagger \sigma_{ss}^z c_{m,s}.
 \end{aligned} \tag{4.81}$$

Prenons le terme contenant la *self-energy* et changeons sa représentation dans l'espace de vecteur d'onde pour celle de l'espace des positions. Nous devons premièrement écrire les opérateurs de création et de destruction dans l'espace de Fourier

$$\begin{aligned}
 c_{k,s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} c_{m,s}^\dagger \\
 c_{k,s} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} c_{m,s}
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

et ainsi

$$\begin{aligned}
\sum_k \Sigma_s c_{k,s}^\dagger c_{k,s} &= \frac{1}{N} \sum_k \Sigma_s \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} c_{m,s}^\dagger \sum_{m'} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{m'}} c_{m',s} \\
&= \sum_{m,m'} \Sigma_s \frac{1}{N} \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'})} c_{m,s}^\dagger c_{m',s} \\
&= \sum_{m,m'} \Sigma_s \delta_{mm'} c_{m,s}^\dagger c_{m',s} \\
&= \sum_m \Sigma_s c_{m,s}^\dagger c_{m,s}.
\end{aligned} \tag{4.83}$$

Nous obtenons alors pour V :

$$\begin{aligned}
V &= \sum_m c_{m,s}^\dagger \left(E_\alpha \delta_{ss'} + \frac{J_{pd}}{2} \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S}_m \delta_{m \in \{N_s\}} - \Sigma_s \delta_{ss'} - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m \boldsymbol{\sigma}_{ss}^z \delta_{ss'} \right) c_{m,s'} \\
&= \sum_m v_m
\end{aligned} \tag{4.84}$$

avec

$$v_m = c_{m,s}^\dagger \left(E_\alpha \delta_{ss'} + \frac{J_{pd}}{2} \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S}_m \delta_{m \in \{N_s\}} - \Sigma_s \delta_{ss'} - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m \boldsymbol{\sigma}_{ss}^z \delta_{ss'} \right) c_{m,s'}. \tag{4.85}$$

Comme le problème contient une dépendance en spin, l'Hamiltonien a été écrit dans l'espace matriciel du spin, la fonction d'onde du porteur correspondant à $H\Psi = E\Psi$ étant un spineur $\Psi = (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow)$. Réécrivons v_m explicitement dans cet

espace 2x2. Les matrices de Pauli utilisées dans l'Hamiltonien sont

$$\begin{aligned}\sigma^x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma^y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma^z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{4.86}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S} = \sigma_{ss'}^x S^x + \sigma_{ss'}^y S^y + \sigma_{ss'}^z S^z,\tag{4.87}$$

où ss' spécifie l'élément de matrice à utiliser.

Dans l'espace du spin

$$v_m \equiv \langle S^z m s | v_m | m s' S^z \rangle\tag{4.88}$$

$$\begin{aligned}v_m &= \begin{pmatrix} E_\alpha & 0 \\ 0 & E_\alpha \end{pmatrix} + \frac{J_{pd}}{2} \begin{pmatrix} S_m^z & S_m^x - iS_m^y \\ S_m^x + iS_m^y & -S_m^z \end{pmatrix} \delta_{m \in \{N_s\}} \\ &\quad - \begin{pmatrix} \Sigma_\uparrow & 0 \\ 0 & \Sigma_\downarrow \end{pmatrix} - \frac{g^*}{2} \mu_B \begin{pmatrix} B_m & 0 \\ 0 & -B_m \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{4.89}$$

$$\begin{aligned}v_m &= \begin{pmatrix} E_\alpha & 0 \\ 0 & E_\alpha \end{pmatrix} + \frac{J_{pd}}{2} \begin{pmatrix} S_m^z & S_m^- \\ S_m^+ & -S_m^z \end{pmatrix} \delta_{m \in \{N_s\}} \\ &\quad - \begin{pmatrix} \Sigma_\uparrow & 0 \\ 0 & \Sigma_\downarrow \end{pmatrix} - \frac{g^*}{2} \mu_B \begin{pmatrix} B_m & 0 \\ 0 & -B_m \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{4.90}$$

ce qui donne pour $m \in \{N_s\}$

$$v_m^M = \begin{pmatrix} E_M + \frac{J_{pd}}{2} S_m^z - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\uparrow & \frac{J_{pd}}{2} S_m^- \\ \frac{J_{pd}}{2} S_m^+ & E_M - \frac{J_{pd}}{2} S_m^z + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\downarrow \end{pmatrix} \quad (4.91)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} v_{\uparrow\uparrow} & v_{\uparrow\downarrow} \\ v_{\downarrow\uparrow} & v_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

et pour $m \notin \{N_s\}$

$$v_m^{NM} = \begin{pmatrix} E_{NM} - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\uparrow & 0 \\ 0 & E_{NM} + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\downarrow \end{pmatrix} \quad (4.92)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} v'_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & v'_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}.$$

L'Hamiltonien P ne contenant pas le retournement de spin (spin-flip), la fonction de Green associée G^0 est

$$G^0 = \begin{pmatrix} G_\uparrow^0 & 0 \\ 0 & G_\downarrow^0 \end{pmatrix}. \quad (4.93)$$

La condition CPA (équation (3.47)) est quant à elle donnée par les deux équations suivantes, étant donné que les moyennes des éléments non-diagonaux en spin sont nulles ($\langle t_{\uparrow\downarrow} \rangle = \langle t_{\downarrow\uparrow} \rangle = 0$)

$$(1-x)\langle t_{m\uparrow\uparrow}^{NM} \rangle_{Th} + x\langle t_{m\uparrow\uparrow}^M \rangle_{Th} = 0 \quad (4.94)$$

$$(1-x)\langle t_{m\downarrow\downarrow}^{NM} \rangle_{Th} + x\langle t_{m\downarrow\downarrow}^M \rangle_{Th} = 0,$$

où NM est pour non-magnétique, x est la concentration d'ions magnétiques et Th signifie thermique.

Cette approche est celle qui a été suivie par Takahashi et Mitsui (Takahashi et Mitsui, 1996). Nous sommes maintenant en mesure d'écrire l'opérateur de diffusion

à un site t_m , défini par (3.36), soit $t_m = v_m[I - G^0 v_m]^{-1}$. L'Annexe III présente le développement permettant d'arriver aux mêmes expressions que (Takahashi et Mitsui, 1996), soit :

a) Cas d'un site non magnétique

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\uparrow}^{NM} &= \frac{V'_\uparrow}{1 - G_\uparrow^0 V'_\uparrow} \\ t_{\downarrow\downarrow}^{NM} &= \frac{V'_\downarrow}{1 - G_\downarrow^0 V'_\downarrow}, \end{aligned} \quad (4.95)$$

où

$$\begin{aligned} V'_\uparrow &= E_{NM} - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\uparrow \\ V'_\downarrow &= E_{NM} + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\downarrow. \end{aligned} \quad (4.96)$$

b) Cas d'un site magnétique

$$\begin{aligned} t_{m\uparrow\uparrow}^M &= \frac{V_\uparrow - G_\downarrow^0(V_\uparrow U_\downarrow - W_\uparrow)}{1 - G_\uparrow^0 V_\uparrow - G_\downarrow^0 U_\downarrow + G_\uparrow^0 G_\downarrow^0(V_\uparrow U_\downarrow - W_\uparrow)} \\ t_{m\downarrow\downarrow}^M &= \frac{V_\downarrow - G_\uparrow^0(U_\uparrow V_\downarrow - W_\downarrow)}{1 - G_\uparrow^0 U_\uparrow - G_\downarrow^0 V_\downarrow + G_\uparrow^0 G_\downarrow^0(U_\uparrow V_\downarrow - W_\downarrow)}, \end{aligned} \quad (4.97)$$

où

$$\begin{aligned} V_\uparrow &= E_M + \frac{J_{pd}}{2} S_m^z - \Sigma_\uparrow - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m \\ V_\downarrow &= E_M - \frac{J_{pd}}{2} S_m^z - \Sigma_\downarrow + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m \\ U_\uparrow &= E_M + \frac{J_{pd}}{2} (S_m^z - 1) - \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\uparrow \\ U_\downarrow &= E_M - \frac{J_{pd}}{2} (S_m^z + 1) + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_\downarrow \\ W_\uparrow &= \frac{J_{pd}^2}{4} [S(S+1) - (S_m^z)^2 - S_m^z] \\ W_\downarrow &= \frac{J_{pd}^2}{4} [S(S+1) - (S_m^z)^2 + S_m^z]. \end{aligned} \quad (4.98)$$

Les six termes précédents ont des significations très simples. En effet, $V_{\uparrow}(V_{\downarrow})$ est le terme diagonal en spin de l'interaction entre un porteur de spin \uparrow (\downarrow) et le potentiel sur un ion magnétique incorporé dans un milieu effectif $\Sigma_{\uparrow}(\Sigma_{\downarrow})$. Un porteur qui a déjà inversé son spin lors de la diffusion précédente est sujet au potentiel $U_{\uparrow}(U_{\downarrow})$. Enfin, l'énergie nécessaire pour qu'une charge inverse sa direction de spin est $W_{\uparrow}(W_{\downarrow})$.

Il est possible, avec un peu d'algèbre, d'aller un peu plus loin que Takahashi et Mitsui (Takahashi et Mitsui, 1996) et de réécrire (4.97) pour obtenir une forme semblable à (4.95), correspondant à ce qui est courant pour des équations de la CPA. Pour ce faire, nous suivons le développement suivant :

$$\begin{aligned}
 t_{mss}^M &= \frac{V_s - G_{-s}^0(V_s U_{-s} - W_s)}{1 - G_s^0 V_s - G_{-s}^0 U_{-s} + G_s^0 G_{-s}^0 (V_s U_{-s} - W_s)} \\
 &= \frac{V_s - G_{-s}^0 V_s U_{-s} + G_{-s}^0 W_s}{(1 - G_s^0 V_s)(1 - G_{-s}^0 U_{-s}) - G_s^0 G_{-s}^0 W_s} \\
 &= \frac{V_s(1 - G_{-s}^0 U_{-s}) + G_{-s}^0 W_s}{(1 - G_s^0 V_s)(1 - G_{-s}^0 U_{-s}) - G_s^0 G_{-s}^0 W_s} \\
 &= \frac{V_s + \frac{W_s G_{-s}^0}{1 - G_{-s}^0 U_{-s}}}{1 - G_s^0 V_s - \frac{G_s^0 W_s G_{-s}^0}{1 - G_{-s}^0 U_{-s}}}.
 \end{aligned} \tag{4.99}$$

Posons

$$X_{-s} \equiv \frac{G_{-s}^0}{1 - G_{-s}^0 U_{-s}}. \tag{4.100}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
 t_{mss}^M &= \frac{V_s + W_s X_{-s}}{1 - G_s^0 V_s - G_s^0 W_s X_{-s}} \\
 &= \frac{V_s + W_s X_{-s}}{1 - G_s^0 (V_s + W_s X_{-s})}.
 \end{aligned} \tag{4.101}$$

Enfin, en définissant

$$\chi_s(S^z) \equiv V_s(S^z) + W_s(S^z)X_{-s}(S^z) \quad (4.102)$$

nous obtenons

$$t_{mss}^M = \frac{\chi_s(S^z)}{1 - G_s^0 \chi_s(S^z)}. \quad (4.103)$$

Il y a en résumé deux types de sites possibles dans le système et, dépendamment sur lequel un porteur se trouve, l'opérateur t_{mss} s'écrit

$$t_{mss}^{NM} = \frac{V'_s}{1 - G_s^0 V'_s} \quad (4.104)$$

ou

$$t_{mss}^M = \frac{\chi_s(S^z)}{1 - G_s^0 \chi_s(S^z)}. \quad (4.105)$$

Puisque la moyenne thermique de (4.103) est nécessaire, la sous-section suivante est dédiée à la présentation de l'approche choisie pour y parvenir.

4.7.2 Moyenne thermique de l'opérateur $t_{ss}(S^z)$ (opérateur de diffusion)

Nous commençons par expliquer une généralité très utile par rapport à la moyenne thermique d'un opérateur en mécanique quantique et nous nous intéressons par la suite au cas spécifique que représente $t_{ss}(S^z)$.

4.7.2.1 Généralité sur la moyenne thermique d'un opérateur

La valeur moyenne en température d'un opérateur s'écrit, dans l'ensemble canonique, comme

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}(\hat{O}e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}. \quad (4.106)$$

Cette expression montre immédiatement une facilité offerte lors du calcul d'une valeur moyenne en température. En effet, seule la trace est nécessaire signifiant que l'Hamiltonien peut être exprimé dans n'importe quelle base complète et non spécifiquement dans la base de ses fonctions propres. Pour le démontrer, supposons A , une matrice dans une base quelconque et A' , la matrice exprimée dans la base de l'Hamiltonien.

$$A' = UAU^{-1} \quad (4.107)$$

$$\text{Tr}[A'] = \text{Tr}[UAU^{-1}] \quad (4.108)$$

Comme la valeur d'une trace ne change pas sous une permutation cyclique nous obtenons

$$\text{Tr}[A'] = \text{Tr}[AU^{-1}U] = \text{Tr}[A]. \quad (4.109)$$

Ceci montre bien que le choix de la base est arbitraire et tributaire de la simplicité dans le calcul. Nous n'avons donc pas besoin d'effectuer de diagonalisations pouvant être longues et complexes.

4.7.2.2 Cas spécifique de $t_{ss}(S^z)$ (opérateur de diffusion)

Dans le cas présent, nous cherchons à moyenniser un opérateur agissant sur un seul site et dont la variation en température apparaît à travers la présence de l'opérateur S_m^z . Par conséquent, il suffit de considérer la partie de l'Hamiltonien impliquant les

opérateurs de spins localisés, $H_S \equiv H_{p-d} + H_{d-B}$.

$$\begin{aligned}
H_S &= \sum_{m \in \{N_S\}} \left[\frac{J_{pd}}{2} \sum_{s,s'} c_{m,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{S} c_{m,s'} - 2\mu_B B_m S^z \right] \\
&= \sum_{m \in \{N_S\}} \left[\frac{J_{pd}}{2} \{ (p_{m\uparrow} - p_{m\downarrow}) S^z + c_{m,\downarrow}^\dagger c_{m,\uparrow} S^+ + c_{m,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow} S^- \} - 2\mu_B B_m S^z \right] \\
&= \sum_{m \in \{N_S\}} \left[\left\{ \frac{J_{pd}}{2} (p_{m\uparrow} - p_{m\downarrow}) - 2\mu_B B_m \right\} S^z + \frac{J_{pd}}{2} (c_{m,\downarrow}^\dagger c_{m,\uparrow} S^+ + c_{m,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow} S^-) \right] \\
&= \sum_{m \in \{N_S\}} \left[h_m S^z + \frac{J_{pd}}{2} (c_{m,\downarrow}^\dagger c_{m,\uparrow} S^+ + c_{m,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow} S^-) \right]
\end{aligned} \tag{4.110}$$

L'opérateur à moyenner étant à un site et subissant l'influence de tous les autres à travers la *self-energy*, nous pouvons, au mieux, traiter un site individuel de façon exacte tout en supposant que celui-ci subi l'influence des autres via un champ moyen, c'est-à-dire que pour un site, il existe une valeur moyenne de trous pour chaque S^z . Dans ce cas, pour un opérateur $\hat{O} = \hat{O}_m(S^z)$, la valeur moyenne s'exprime comme

$$\langle \hat{O}_m(S^z) \rangle = \frac{\text{Tr} \left(\hat{O}_m(S^z) e^{-\beta \hat{H}_S} \right)}{\text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_S} \right)} = \frac{\sum_{S^z} O(S^z) e^{-\beta h_m(S^z) S^z}}{\sum_{S^z} e^{-\beta h_m(S^z) S^z}} \equiv \sum_{S^z} O(S^z) P(S^z), \tag{4.111}$$

où $h_m(S^z) = \frac{J_{pd}}{2} [\langle p_{m\uparrow}(S^z) \rangle - \langle p_{m\downarrow}(S^z) \rangle] - 2\mu_B B_m$.

Ce résultat est exact dans le cadre de la CPA, mais pour alléger les calculs numériques, nous allons simplifier les choses et faire l'approximation que $h_m(S^z)$ ne dépend pas directement de S^z , ce qui équivaut à supposer un champ moyen de spin. L'expression pour h_m , est dans ce cas

$$h_m = \frac{J_{pd}}{2} [\langle p_{m\uparrow} \rangle - \langle p_{m\downarrow} \rangle] - 2\mu_B B_m \tag{4.112}$$

avec

$$\langle p_{ms} \rangle = \int dE f(E) \left(-\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} \{ \langle G_s^{r,0}(E) \rangle \}. \quad (4.113)$$

La probabilité que la valeur du spin localisé soit S^z devient donc

$$P(S^z) = \frac{e^{-\beta h_m S^z}}{\sum_{S^z} e^{-\beta h_m S^z}} \quad (4.114)$$

et la valeur moyenne de t_{mss}^M , en laissant tomber l'indice de site,

$$\langle t_{ss}^M \rangle = \sum_{S^z} \frac{\chi_s(S^z)}{1 - G_s^0 \chi_s(S^z)} P(S^z). \quad (4.115)$$

4.7.3 Formulation de la relation auto-cohérente pour la *self-energy*

Dans les lignes suivantes, une formule auto-cohérente pour $\Sigma_s(\varepsilon)$ est présentée à l'aide de (4.94). Nous avons, en laissant tomber les indices de site,

$$t_{ss}^{NM} = -\frac{x}{1-x} \langle t_{ss}^M \rangle. \quad (4.116)$$

En développant le terme de gauche, nous obtenons

$$\frac{E_{NM} - (s) \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_s}{1 - G_s^0(E_{NM} - (s) \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_s)} = -\frac{x}{1-x} \langle t_{ss}^M \rangle. \quad (4.117)$$

En posant $\Xi_s \equiv 1 - G_s^0(E_{NM} - (s) \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_s)$, l'expression recherchée pour la *self-energy* est

$$\Sigma_s(E) = [E_{NM} - (s) \frac{g^*}{2} \mu_B B_m] + \frac{x}{1-x} \Xi_s \langle t_{ss}^M \rangle, \quad (4.118)$$

où la *self-energy* est incluse dans Ξ_s et $\langle t_{ss}^M \rangle$, d'où l'épithète «auto-cohérente».

4.7.3.1 Cas spécial : $T = 0$

Lorsque la température est nulle, il est possible d'étendre le développement analytique de $\Sigma_s(\varepsilon)$.

Pour $T = 0$, la probabilité que la valeur du spin localisé soit S^z est

$$P(S^z) = \begin{cases} = 1 & \text{si } S^z = S \\ = 0 & \text{autrement,} \end{cases} \quad (4.119)$$

ce qui donne, pour la moyenne thermique de l'opérateur t_{ss}^M ,

$$\langle t_{ss}^M(S^z) \rangle_{T=0} = t_{ss}^M(S). \quad (4.120)$$

Dans ce cas, nous pouvons écrire (4.98)

$$\begin{aligned} V_{\uparrow}(S) &= E_M + \frac{J_{pd}}{2}S - \frac{g^*}{2}\mu_B B_m - \Sigma_{\uparrow} \\ V_{\downarrow}(S) &= E_M - \frac{J_{pd}}{2}S + \frac{g^*}{2}\mu_B B_m - \Sigma_{\downarrow} \\ U_{\uparrow}(S) &= E_M + \frac{J_{pd}}{2}(S-1) - \frac{g^*}{2}\mu_B B_m - \Sigma_{\uparrow} \\ U_{\downarrow}(S) &= E_M - \frac{J_{pd}}{2}(S+1) + \frac{g^*}{2}\mu_B B_m - \Sigma_{\downarrow} \\ W_{\uparrow}(S) &= 0 \\ W_{\downarrow}(S) &= \frac{J_{pd}^2 S}{2}. \end{aligned} \quad (4.121)$$

Commençons tout d'abord par considérer le cas d'un porteur avec le spin \uparrow . À l'aide de (4.96) et de (4.121), nous pouvons définir

$$\begin{aligned} V'_{\uparrow} &\equiv \epsilon_{\uparrow}^{NM} - \Sigma_{\uparrow} \\ V_{\uparrow}(S) &\equiv \epsilon_{\uparrow}^M - \Sigma_{\uparrow}. \end{aligned} \quad (4.122)$$

Sachant aussi que $W_{\uparrow}(S) = 0$ (4.121), l'équation (4.102) s'écrit

$$\chi_{\uparrow}(S) = V_{\uparrow}(S). \quad (4.123)$$

Ceci montre qu'à $T = 0$, le calcul de la DOS des porteurs \uparrow est indépendant de celui des porteurs \downarrow . La condition (4.94) s'énonce donc

$$(1-x) \frac{[\epsilon_{\uparrow}^{NM} - \Sigma_{\uparrow}]}{1 - G_{\uparrow}^0 [\epsilon_{\uparrow}^{NM} - \Sigma_{\uparrow}]} + x \frac{[\epsilon_{\uparrow}^M - \Sigma_{\uparrow}]}{1 - G_{\uparrow}^0 [\epsilon_{\uparrow}^M - \Sigma_{\uparrow}]} = 0. \quad (4.124)$$

En mettant l'expression sur un dénominateur commun et après un peu d'algèbre, nous obtenons

$$\Sigma_{\uparrow} = \epsilon_{\uparrow}^{NM} + \frac{x [\epsilon_{\uparrow}^M - \epsilon_{\uparrow}^{NM}]}{1 - G_{\uparrow}^0 [\epsilon_{\uparrow}^M - \Sigma_{\uparrow}]}. \quad (4.125)$$

Dans le cas d'un porteur de spin \downarrow , la quantité $W_{\downarrow}(S)$ est différente de zéro. Le problème semble compliqué à première vue, mais nous montrons qu'il est possible d'obtenir une forme similaire à (4.124). Encore une fois, nous réécrivons

$$\begin{aligned} V'_{\downarrow} &\equiv \epsilon_{\downarrow}^{NM} - \Sigma_{\downarrow} \\ V_{\downarrow}(S) &\equiv \epsilon_{\downarrow}^M - \Sigma_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (4.126)$$

La quantité $\chi_{\downarrow}(S)$ prend la forme

$$\begin{aligned} \chi_{\downarrow}(S) &= \epsilon_{\downarrow}^M - \Sigma_{\downarrow} + \frac{J_{pd}^2 S}{2} \frac{G_{\uparrow}^0}{1 - G_{\uparrow}^0 U_{\uparrow}} \\ &= \epsilon_{\downarrow}^M - \Sigma_{\downarrow} + \frac{J_{pd}^2 S}{2} \frac{G_{\uparrow}^0}{1 - G_{\uparrow}^0 \left[\epsilon_{\uparrow}^M - \frac{J_{pd}}{2} - \Sigma_{\uparrow} \right]}. \end{aligned} \quad (4.127)$$

Contrairement au cas précédent, le calcul de la DOS pour un spin \downarrow inclut une dépendance avec le spin \uparrow .

Définissons

$$\Gamma_{\uparrow}^M \equiv \frac{J_{pd}^2 S}{2} \frac{G_{\uparrow}^0}{1 - G_{\uparrow}^0 \left[\epsilon_{\uparrow}^M - \frac{J_{pd}}{2} - \Sigma_{\uparrow} \right]}, \quad (4.128)$$

ce qui permet d'écrire χ comme

$$\begin{aligned} \chi_{\downarrow}(S) &= \epsilon_{\downarrow}^M + \Gamma_{\uparrow}^M - \Sigma_{\downarrow} \\ &\equiv \Theta^M - \Sigma_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (4.129)$$

La condition (4.94) devient

$$(1 - x) \frac{[\epsilon_{\downarrow}^{NM} - \Sigma_{\downarrow}]}{1 - G_{\downarrow}^0 [\epsilon_{\downarrow}^{NM} - \Sigma_{\downarrow}]} + x \frac{[\Theta^M - \Sigma_{\downarrow}]}{1 - G_{\downarrow}^0 [\Theta^M - \Sigma_{\downarrow}]} = 0, \quad (4.130)$$

ce qui est la même forme que (4.124) et donc

$$\Sigma_{\downarrow} = \epsilon_{\downarrow}^{NM} + \frac{x [\Theta^M - \epsilon_{\downarrow}^{NM}]}{1 - G_{\downarrow}^0 [\Theta^M - \Sigma_{\downarrow}]}. \quad (4.131)$$

Nous pouvons penser que cette représentation est bonne pour une température non nulle, mais proche de zéro. En réalité, c'est seulement le cas si p n'est pas trop faible. En effet, si p est vraiment petit, le numérateur de l'exposant de l'équation (4.114) ($h_m S^z$) est une quantité très faible. Dans ce cas, si $k_B T$ n'est pas plusieurs ordres de grandeur plus petit que $h_m S^z$, nous avons une probabilité $P(S^z)$ presque uniforme pour tous les S^z . Le comportement est donc paramagnétique même à $T \rightarrow 0$, étant donné qu'il n'y a pas assez de porteurs pour propager le magnétisme entre les ions. Dans le cas d'une densité de trous très petite, c'est seulement à $T = 0$ précisément que nous regagnons une différence entre les spins \uparrow et \downarrow telle que donnée par (4.125) et (4.131), puisqu'à température nulle, les spins localisés sont fixés dans la direction z positive, qu'il y ait des trous ou non.

4.7.4 Algorithme du calcul pour $T \neq 0$

Pour être en mesure d'effectuer un calcul, nous devons spécifier plusieurs paramètres. Nous pouvons les séparer en deux catégories : les paramètres intrinsèques et extrinsèques. Cette dernière fait référence aux données que nous considérons connues expérimentalement : la température (T), le champ magnétique (B_z^0), la fraction d'impuretés (x) et la densité de trous (p) sont des données externes spécifiées avant le début du calcul. L'amplitude de l'interaction magnétique (J_{pd}), la valeur des spins localisés (S) et les potentiels non magnétiques (E_M et E_{NM}) sont pour leur part des caractéristiques que nous fixons et qui sont propres à un matériau particulier. Une fois ces paramètres spécifiés, le calcul de la fonction de Green moyenne à température non-nulle peut être séparé selon les étapes suivantes :

- a) Supposition de valeurs d'essais pour $[\langle p_\uparrow \rangle - \langle p_\downarrow \rangle]_0$, $\Sigma_{0,\uparrow}$ et $\Sigma_{0,\downarrow}$.
- b) Calcul itératif de Σ_\uparrow et Σ_\downarrow en utilisant (4.118).
- c) Détermination du niveau de Fermi en utilisant

$$p = \int dE f(E) \left(-\frac{1}{\pi} \right) \left[\text{Im}\{\langle G_\uparrow^{r,0}(E) \rangle\} + \text{Im}\{\langle G_\downarrow^{r,0}(E) \rangle\} \right], \quad (4.132)$$

où p est la densité de trous qui a été fixée.

- d) Calcul de $\langle p_\uparrow \rangle$ et $\langle p_\downarrow \rangle$.
- e) Répétition des étapes b-c-d jusqu'à l'atteinte de la convergence.

Une fois ces étapes complétées, les coefficients du transport sont obtenus en remplaçant $\Sigma_s(E)$ dans (4.75) et (4.76) par les résultats du calcul.

4.8 Niveaux d'une impureté à $T = 0$

Les densités d'états obtenues à partir des équations décrites dans les sous-sections précédentes montrent l'effet de l'incorporation d'une grande quantité d'impuretés dans un cristal parfait. Les changements les plus perceptibles subis par la DOS (par rapport à un cristal parfait) se situent autour des énergies correspondant aux niveaux qu'une impureté créerait s'il n'y en avait qu'une seule dans le matériau.

Au cours des lignes suivantes, nous dérivons les expressions pour déterminer les niveaux d'énergie qu'une impureté peut créer lorsqu'elle s'intègre dans la matrice et ce, à $T = 0$. Imaginons un système qui ne contient qu'une seule impureté et que celle-ci est magnétique. Considérons que $G_s^0(E)$ est la fonction de Green d'un porteur de spin s dans le cristal parfait, c'est-à-dire découlant de H_0 (Hamiltonien du cristal), alors que $uc_{l,s}^\dagger c_{l,s}$ est le terme correspondant à l'impureté au site l dans l'Hamiltonien total. Si nous pouvons écrire l'opérateur T_{ss} sous une forme correspondant à

$$T_{ss} = c_{l,s}^\dagger \frac{u}{1 - uG_s^0} c_{l,s}, \quad (4.133)$$

nous pouvons facilement montrer (Economu, 1983) que les niveaux de l'impureté E_p s'obtiennent en trouvant la solution de

$$G_s^0(E_p) = \frac{1}{u}. \quad (4.134)$$

Dans notre cas, s'il n'y a qu'une seule impureté, l'opérateur T_{ss} est donné par t_{ss}^M en ne considérant pas le milieu effectif ($\Sigma_s(E) = 0$). Comme nous l'avons montré (équation (4.103))

$$t_{ss}^M(S^z) = \frac{\chi_s(S^z)}{1 - G_s^0 \chi_s(S^z)}, \quad (4.135)$$

ce qui est de la forme de (4.133). Évidemment, comme il y a une dépendance en température, nous considérons la moyenne thermique de $t_{ss}^M \rightarrow$

$\langle t_{ss}^M \rangle_{Th} = \sum_{S^z} t_{ss}^M(S^z) P(S^z)$. De plus, nous sommes à température nulle, comme à la Section 4.7.3.1, ce qui implique $P(S) = 1$ et $P(S^z \neq S) = 0$. Nous utilisons donc

$$t_{ss}^M(S) = \frac{\chi_s(S)}{1 - G_s^0 \chi_s(S)}. \quad (4.136)$$

Considérant (4.134), les niveaux de l'impureté sont donnés, à $T = 0$, par

$$G_s^0(E_p) = \frac{1}{\chi_s(S, E_p)}, \quad (4.137)$$

en se rappelant que

$$\chi_s(S, E_p) = V_s(S) + W_s(S) X_{-s}(S, E_p) \quad (4.138)$$

avec

$$X_{-s}(S, E_p) = \frac{G_{-s}^0(E_p)}{1 - G_{-s}^0(E_p) U_{-s}(S)}. \quad (4.139)$$

Lorsque $S^z = S$ et $B_z^0 = 0$, pour une seule impureté,

$$\begin{aligned} V_{\uparrow}(S) &= E_M + \frac{J_{pd}}{2} S \\ V_{\downarrow}(S) &= E_M - \frac{J_{pd}}{2} S \\ U_{\uparrow}(S) &= E_M + \frac{J_{pd}}{2} (S - 1) \\ U_{\downarrow}(S) &= E_M - \frac{J_{pd}}{2} (S + 1) \\ W_{\uparrow}(S) &= 0 \\ W_{\downarrow}(S) &= \frac{J_{pd}^2 S}{2}. \end{aligned} \quad (4.140)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}\chi_{\uparrow}(S, E_p) &= E_M + \frac{J_{pd}S}{2} \\ \chi_{\downarrow}(S, E_p) &= E_M - \frac{J_{pd}S}{2} + \frac{J_{pd}^2 S}{2} \frac{G_{\uparrow}^0(E_p)}{1 - G_{\uparrow}^0(E_p) \left[E_M + \frac{J_{pd}}{2}(S - 1) \right]}.\end{aligned}\quad (4.141)$$

Le cristal parfait est un semi-conducteur dans lequel nous considérons les états de spin comme dégénérés ($G_{\uparrow}^0(E) = G_{\downarrow}^0(E)$) et dans les DMS, une impureté Mn se place au voisinage des bandes de valence. Nous décrivons donc le cristal par une bande de trous lourds, dont la densité d'états est semi-circulaire (3.61) :

$$\begin{aligned}G_s^0(E) &= \frac{2}{W^2} \left(E - \sqrt{E^2 - W^2} \right) \\ &= \frac{2}{W} \left(E' - \sqrt{E'^2 - 1} \right),\end{aligned}\quad (4.142)$$

où W est la demi-largeur de bande et $E' = E/W$. Par souci de simplicité, posons

$$F(E') \equiv E' - \sqrt{E'^2 - 1} \quad (4.143)$$

et donc

$$G_s^0(E') = \frac{2}{W} F(E'). \quad (4.144)$$

Revenons, pour le moment, à (4.134). En utilisant (4.142), nous obtenons

$$\begin{aligned}\frac{2}{W} \left(E'_p - \sqrt{E_p'^2 - 1} \right) &= \frac{1}{u} \\ \Rightarrow E'_p &= u' + \frac{1}{4u'},\end{aligned}\quad (4.145)$$

ce qui est la position du niveau créé par l'impureté dans le système.

Si le porteur est de spin \uparrow , u' s'écrit

$$u' = \frac{\chi_{\uparrow}(S, E_P)}{W} = E'_M + \frac{J'_{pd}S}{2}. \quad (4.146)$$

Le niveau de l'impureté est alors

$$\begin{aligned} E'_p &= E'_M + \frac{J'_{pd}S}{2} + \frac{1}{4 \left(E'_M + \frac{J'_{pd}S}{2} \right)} \\ &= \left(\frac{4 \left[E'_M + \frac{J'_{pd}S}{2} \right]^2 + 1}{4 \left[E'_M + \frac{J'_{pd}S}{2} \right]} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{[J'_{pd}S + 2E'_M]^2 + 1}{J'_{pd}S + 2E'_M} \right). \end{aligned} \quad (4.147)$$

Si le porteur est de spin \downarrow , u' s'écrit

$$\begin{aligned} u' &= \frac{\chi_{\downarrow}(S, E_P)}{W} = E'_M - \frac{J'_{pd}S}{2} + \frac{J'^2_{pd}S}{2W} \frac{\frac{2}{W}F(E'_p)}{1 - \frac{2}{W}F(E'_p) \left[E'_M + \frac{J'_{pd}}{2}(S-1) \right]} \\ &= E'_M - \frac{J'_{pd}S}{2} + \frac{J'^2_{pd}SF(E'_p)}{1 - 2F(E'_p) \left[E'_M + \frac{J'_{pd}}{2}(S-1) \right]}. \end{aligned} \quad (4.148)$$

Il est plus facile de ne pas utiliser directement (4.145) cette fois-ci, mais plutôt une des équations intermédiaires dans l'obtention de (4.145), soit

$$F(E'_p) = \frac{1}{2u'} \Rightarrow u' = \frac{1}{2F(E'_p)}. \quad (4.149)$$

En utilisant (4.148) dans (4.149) et en réarrangeant l'équation, nous obtenons

$$\left(J'^2_{pd}S(S+1) - 4E'_M \left(E'_M - \frac{J'_{pd}}{2} \right) \right) [F(E'_p)]^2 + (4E'_M - J'_{pd}) F(E'_p) - 1 = 0. \quad (4.150)$$

Cette équation étant quadratique, il existe deux possibilités pour le niveau de l'impureté dans le cas d'un porteurs \downarrow . Les racines de cette équation sont

$$\begin{aligned} F_1(E'_p) &= \frac{1}{J'_{pd}S + 2E'_M} \\ F_2(E'_p) &= -\frac{1}{J'_{pd}(S+1) - 2E'_M}. \end{aligned} \quad (4.151)$$

Avec (4.151), les deux niveaux d'impureté pour le spin \downarrow sont

a)

$$E'_p = \frac{1}{2} \left(\frac{[J'_{pd}S + 2E'_M]^2 + 1}{J'_{pd}S + 2E'_M} \right) \quad (4.152)$$

b)

$$E'_p = -\frac{1}{2} \left(\frac{[J'_{pd}(S+1) - 2E'_M]^2 + 1}{J'_{pd}(S+1) - 2E'_M} \right) \quad (4.153)$$

4.8.1 Assymétrie des niveaux d'impuretés

Le niveau de l'impureté pour un porteur de spin \uparrow (4.147) se situe au même endroit que l'un des niveaux pour un porteur de spin \downarrow (4.152). Par contre, le niveau (4.153) et les deux autres qui sont égaux ((4.147) et (4.152)) ne sont pas symétriques par rapport à zéro et ne le seront jamais si J'_{pd} et E'_M sont non nuls. Si l'impureté n'est pas magnétique ou l'est très faiblement, c'est-à-dire que $J'_{pd} \rightarrow 0$, les trois niveaux (4.147), (4.152) et (4.153) tendent vers la même valeur

$$E'_{p, J'_{pd} \rightarrow 0} = \frac{4E'_M + 1}{4E'_M}. \quad (4.154)$$

Dans le cas contraire où E'_M est nul, le niveau (4.153) conserve son assymétrie par rapport aux deux autres, (4.147) et (4.152). Si la valeur d'un spin localisé devient

très grande ($S \gg 1$), nous obtenons cette fois-ci des niveaux qui sont symétriques,

$$\begin{aligned} E'_{p,S \gg 1}, \text{Énergie positive} &= \frac{J'_{pd}S}{2} \\ E'_{p,S \gg 1}, \text{Énergie négative} &= -\frac{J'_{pd}S}{2} \end{aligned} \quad (4.155)$$

car, dans notre modèle, J'_{pd} est strictement positif.

4.8.2 Niveau d'intérêt pour une impureté dans le DMS

Étant donné que seul le début de la bande est occupé (faible densité de trous), le niveau de l'impureté qui nous intéresse vraiment est

$$E'_p = -\frac{1}{2} \left(\frac{[J'_{pd}(S+1) - 2E'_M]^2 + 1}{J'_{pd}(S+1) - 2E'_M} \right). \quad (4.156)$$

Nous savons qu'un niveau dû à un ion Mn se place à environ 113 meV au dessus de la bande des trous lourds du GaAs à 4K (Schairer et Schmidt, 1974). Comme le haut de la bande dans notre modèle est situé à $\varepsilon' = -1$, nous avons, connaissant W , la contrainte suivante sur les valeurs de J_{pd} et E_M :

$$\frac{1}{2} \left(\frac{[J'_{pd}(S+1) - 2E'_M]^2 + 1}{J'_{pd}(S+1) - 2E'_M} \right) - 1 = \frac{113 \times 10^{-3}}{W}. \quad (4.157)$$

Si nous définissons $113 \times 10^{-3}/W \equiv E'_{imp}$, nous obtenons

$$J'_{pd} = \frac{2E'_M + E'_{imp} + 1 \pm \sqrt{E'_{imp}(E'_{imp} + 2)}}{(S+1)}. \quad (4.158)$$

4.9 Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous avons développé notre modèle à partir d'un Hamiltonien en représentation liaisons fortes dans lequel nous avons intégré le désordre à l'aide d'une formulation par milieu effectif appelée approximation du potentiel cohérent (CPA). Nous avons aussi montré comment, avec tout Hamiltonien ayant une forme analogue au nôtre, nous pouvons exprimer la conductivité d'un solide selon une approche quantique. Ces expressions ont ensuite été analysées dans le but de comprendre comment le signe du coefficient de Hall se comporte.

Nous sommes maintenant en possession d'un modèle pour l'étude du magnéto-transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués en fonction des divers paramètres de ces matériaux. Les résultats sont présentés dans le chapitre suivant (Chapitre 5). La discussion de ceux-ci et la comparaison avec les données expérimentales disponibles se trouvent au Chapitre 6.

CHAPITRE 5

RÉSULTATS

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats du modèle développé au Chapitre 4. Nous discutons premièrement de certaines généralités par rapport au matériau étudié. Nous passons ensuite au calcul des propriétés du transport dans le cas où il n'y a pas de champ magnétique externe appliqué au système. Finalement, nous regardons l'effet de la présence d'un champ non-nul.

5.1 Généralités

Il est de mise de commencer par présenter les caractéristiques du GaAs que nous utilisons pour les calculs et aussi d'esquisser le comportement général de la densité d'états (DOS) dans un modèle CPA.

5.1.1 Constantes

Le paramètre de maille du cristal non dopé est nécessaire pour le calcul des constantes multiplicatives de la magnéto-conductivité (4.75), de la conductivité de Hall (4.76) et du coefficient de Hall (4.77). Le GaAs a une structure zinc-blende avec un paramètre $a_0 = 5,64\text{\AA}$ (Yu et Cardona, 2001). Dans nos équations, nous avons considéré que le cristal parfait avait plutôt une maille cubique simple. Pour utiliser une valeur numérique consistante, nous ne pouvons donc pas directement utiliser a_0 . La solution choisie, est d'imposer au volume de la maille élémentaire d'un cubique simple ($v_{\text{cs}} = a^3$) d'être égal à celui d'un zinc-blende ($v_{\text{zb}} = \frac{a_0^3}{4}$). Ceci implique que la

constante a devant être utilisée dans nos calculs est $a = \left(\frac{(5,64 \times 10^{-10})^3}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \approx 3,553 \text{Å}$.

L'autre constante se définissant à partir du cristal parfait GaAs est la demi-largeur de bande W , à partir de laquelle tous les paramètres énergétiques sont définis. Par exemple, pour obtenir la valeur de $k_B T$ en électron-volt, la demi-largeur de bande est nécessaire. Le choix de sa valeur numérique est cependant loin d'être simple. Dans les travaux précédents (Kagami *et al.*, 2005; Takahashi, 2004; Ivanov *et al.*, 2003; Bouzerar *et al.*, 2004; Calderon, *et al.*, 2002), les auteurs ont utilisé des valeurs se situant entre 2 et 5 eV, ce qui est un domaine plutôt large. En effet, si la température de Curie est par exemple égale à $\frac{k_B T_c}{W} = 5 \times 10^{-3}$, dépendemment du choix de W , $T_c \approx 116 \text{ K}$ pour $W = 2 \text{ eV}$ et $T_c \approx 290 \text{ K}$ pour $W = 5 \text{ eV}$. Ces deux résultats sont très différents, montrant ainsi l'importance de la valeur choisie pour W pour la comparaison avec les données expérimentales. Notons quand même que les expressions du transport ont été écrites de telle façon que la valeur précise de W ne change pas le résultat, puisque tous les termes entrant dans le calcul sont des variables normalisées. La valeur de W devient nécessaire seulement lorsque nous voulons connaître une température en Kelvin où une énergie en electron-volt.

Il est possible de définir W de la manière suivante. La densité d'états près du bord de bande définissant le maximum de la bande de valence (le minimum si on considère les énergies vers le bas comme discuté dans le chapitre précédent) doit correspondre avec la densité d'états obtenue avec une bande parabolique dont la courbure est dictée par une masse effective $m_{hh} = 0.53m_0$ (Yu et Cardona, 2001). Nous devons trouver le bon paramètre de saut t pour satisfaire cette condition. Lorsque nous approchons du maximum de la bande de valence, $k_x \rightarrow 0$, $k_y \rightarrow 0$ et

$k_z \rightarrow 0$. Nous pouvons donc écrire

$$\begin{aligned}\varepsilon_k &= -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) \\ &\approx -6t + ta^2 k^2.\end{aligned}\tag{5.1}$$

Comme la courbure de la bande parabolique est $\frac{\hbar^2}{2m_{hh}m_0}$,

$$t = \frac{\hbar^2}{2m_{hh}m_0a^2} \approx 0,57\text{eV}.\tag{5.2}$$

La demie largeur de bande serait donc égale à

$$W = 6t \approx 3,42\text{eV}.\tag{5.3}$$

Cette valeur se situe à peu près à mi-chemin entre 2 et 5 eV, les valeurs inférieure et supérieure utilisées dans la littérature. Est-elle correcte ? Cette question vaut la peine d'être posée, mais la réponse est difficile. Pour le moment, nous allons conserver le plus possible nos résultats en terme des paramètres normalisés par W , les résultats quantitatifs n'étant pas de toute manière très fiables, puisque nous utilisons un modèle à une bande.

Finalement, afin d'effectuer des calculs à champ magnétique non nul, nous devons trouver la valeur de g^* pour le GaAs. Pour ce faire, identifions l'Hamiltonien (4.7) avec la partie linéaire en champ magnétique de l'Hamiltonien de Luttinger pour les trous (Luttinger, 1956), que nous exprimons comme (van Kesteren *et al.*, 1990)

$$H_h = -2\mu_B \sum_{i=x,y,z} (\kappa J_{h,i} + q J_{h,i}^3) B_i,\tag{5.4}$$

où $J_{h,i}$ est l'opérateur moment cinétique des trous. Le facteur anisotrope q étant beaucoup plus petit que κ , nous pouvons le négliger pour les matériaux massifs.

Ce faisant, nous obtenons

$$H_h = -2\mu_B \sum_{i=x,y,z} \kappa J_{h,i} B_i. \quad (5.5)$$

En comparant (5.5) avec (4.7), nous pouvons faire le rapprochement

$$g^* = 2\kappa. \quad (5.6)$$

Il reste maintenant à trouver la valeur de κ pour GaAs. Nam *et al.* (Nam *et al.*, 1976) ont obtenu une valeur égale à $\kappa = 1,0 \pm 0,2$, Willmann *et al.* (Willmann *et al.*, 1974) $\kappa = 1,1 \pm 0,1$ et Reine *et al.* (Reine *et al.*, 1970) $\kappa = 1,2 \pm 0,25$. Toutes ces valeurs sont essentiellement égales. Nous choisissons pour nos calculs la valeur $\kappa = 1,1$ et ainsi

$$g^* = 2,2. \quad (5.7)$$

5.1.2 Densité d'états (DOS)

Le comportement de la densité d'états dans un modèle CPA, peu importe lequel, présente certaines généralités. La CPA peut prédire une faible modification de la densité d'états due à l'ajout d'impuretés (comme le fait l'approximation du cristal virtuel, peu importe les paramètres). Elle peut aussi prédire l'existence de pseudo-bandes interdites (pseudo-gaps), c'est-à-dire que les niveaux d'impuretés s'hybrident en partie avec la bande du cristal. Finalement, la CPA peut, dans certaines circonstances, donner des bandes d'impuretés bien définies et, ainsi, de vraies bandes interdites entre les bandes de valence et d'impuretés. L'émergence de ces trois différents comportement est contrôlée par l'amplitude des interactions entre un porteur et les impuretés. Dans notre cas, si nous prenons l'origine des énergies comme étant E_{NM} , les comportements possibles sont conditionnés par E_M et J_{pd} .

Il faut aussi noter qu'étant donnée la définition du problème (équation (4.94)), la température a une influence directe sur la forme de la densité d'états. Pour l'illustrer, nous présentons sur les Figure 5.1, 5.2 et 5.3, la DOS pour différentes valeurs de paramètres. Notons que pour les trois figures $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

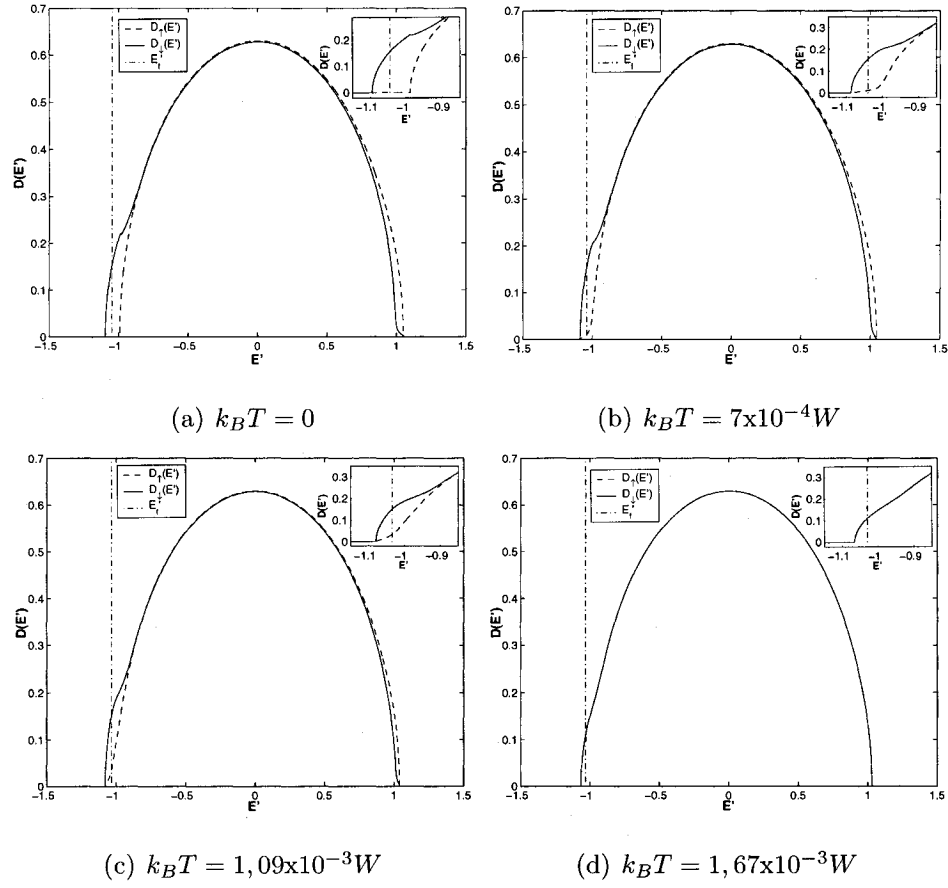


FIG. 5.1 Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.3W$ et $p = 0,1x$

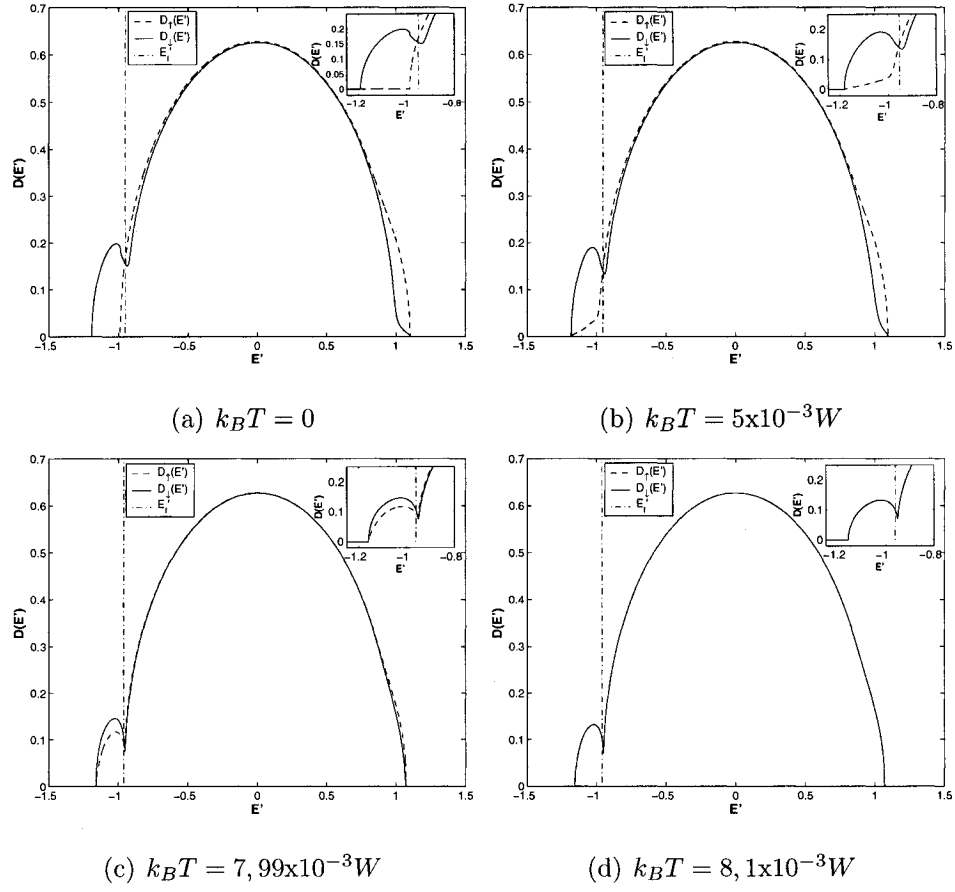


FIG. 5.2 Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.4W$ et $p = 0,8x$

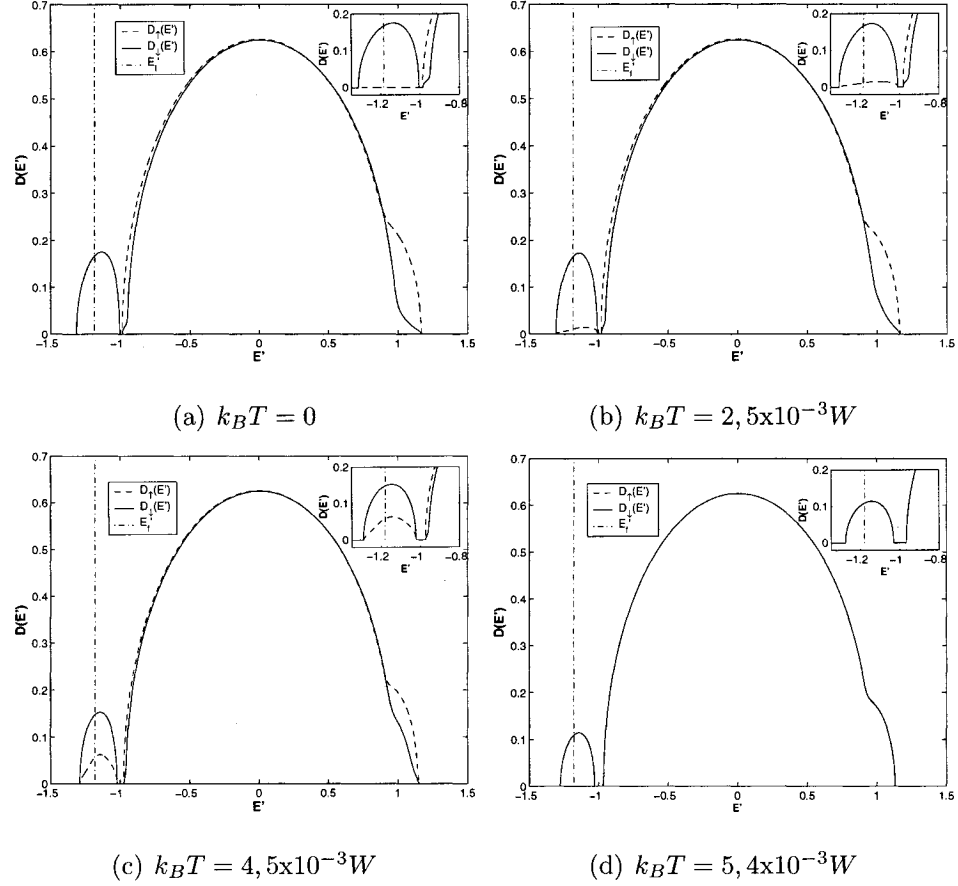


FIG. 5.3 Densité d'états pour diverses températures lorsque $x = 0,053$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$, $J_{pd} = 0.5W$ et $p = 0,3x$

Ces trois figures montrent bien l'apparition d'une bande d'impuretés dans les énergies négatives, qui se sépare complètement de la bande de valence lorsque J_{pd} devient assez élevé. L'influence de la température est également facilement observable. Nous remarquons par exemple que pour $J_{pd} = 0.5W$, lorsque $T < T_c$, le bord de la bande de valence présente deux structures, mais que celle de gauche (énergies négatives) disparaît pour $T \geq T_c$. Notons finalement que les niveaux d'impuretés se situant dans les énergies positives sont aussi facilement visibles.

5.1.2.1 Nombre d'états venant des impuretés

Nous allons discuter ici du nombre d'états accessibles à un porteur de spin s se situant dans les parties de la DOS modifiées par la présence d'impuretés. Par exemple, dans les travaux de (Hwang et Das Sarma, 2005) et (Velicky *et al.*, 1968), lorsqu'une bande d'impuretés bien définie existe, le poids de cette bande-ci est x , c'est-à-dire que l'intégration de la densité d'états d'un porteur de spin s dans un domaine n'englobant que la bande d'impuretés, donne la valeur x , ce qui signifie que le nombre d'états dans cette bande est égale au nombre d'impuretés. C'est la raison pour laquelle (Hwang et Das Sarma, 2005) obtiennent une valeur de la résistivité qui diverge en $p = x$ pour une constante d'échange J_{pd} suffisante pour amener une bande d'impuretés séparée. En effet, à cette valeur, l'énergie de Fermi est dans la bande interdite, ce qui, pour $T = 0$ ainsi que pour $T \neq 0$ avec une bande interdite assez large, donne une résistivité infinie. Par contre, dans notre modèle CPA, nous avons vu qu'à $T = 0$ pour des spins quantifiés (S n'est pas beaucoup plus grand que un), il existe deux énergies possibles autour desquelles les impuretés peuvent créer des états pour un trou de spin \downarrow alors qu'il n'y en a qu'une seule pour un trou \uparrow . Pour $T \neq 0$, comme les DOS des deux directions de spin dépendent l'une de l'autre pour devenir les mêmes lorsque $T \geq T_c$, il y a deux endroits possibles pour chacune. Ayant considéré qu'à température nulle $S^z = S$, une bande d'impuretés dans les énergies négatives sera composée exclusivement d'états de spin \downarrow , mais le nombre d'états ne sera pas égal à x comme dans le cas des autres travaux. L'explication réside dans le fait qu'il existe un certain nombre d'états \downarrow dans les énergies positives. Illustrons ceci par la DOS (Figure 5.4) d'un système contenant une fraction d'impuretés $x = 0,053$, dont les caractéristiques intrinsèques sont $J_{pd} = W$ et $E_M = 0$, alors que les paramètres externes sont $\mu_B B = 0$ et $k_B T = 0$.

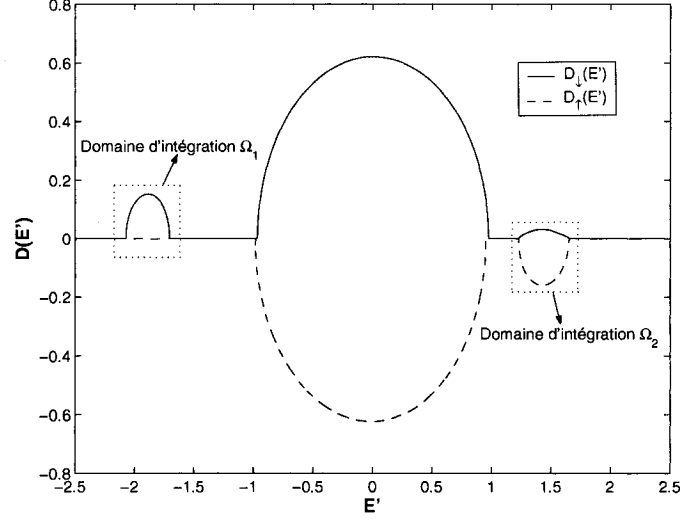


FIG. 5.4 DOS pour $x = 0,053$, $J_{pd} = W$, $E_M = 0$, $\mu_B B = 0$ et une température de $k_B T = 0$

La densité d'états des trous \downarrow comporte deux bandes d'impuretés, alors que celle des trous \uparrow n'en présente qu'une. Il semble donc que pour la direction \downarrow , le nombre d'états contenu dans le domaine d'intégration Ω_1 est plus petit que la fraction d'impuretés. Pour le domaine Ω_2 , le nombre d'états \downarrow devrait correspondre avec le nombre d'états manquant pour atteindre x alors qu'il devrait être égal à x pour les \uparrow . En effectuant les intégrales numériquement, nous obtenons les résultats suivants :

$$\begin{aligned}
 p_{\downarrow}^1 &\equiv \int_{\Omega_1} D_{\downarrow}(E') dE' = 0.0441 = 0.8321x \\
 p_{\downarrow}^2 &\equiv \int_{\Omega_2} D_{\downarrow}(E') dE' = 0.0089 = 0.1679x \\
 p_{\uparrow}^2 &\equiv \int_{\Omega_2} D_{\uparrow}(E') dE' = 0.0530 = x.
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Nous obtenons donc, comme prévu, $p_{\downarrow}^1 + p_{\downarrow}^2 = x$ et $p_{\uparrow}^2 = x$. Cette particularité de notre modèle nous permet déjà d'affirmer qu'une divergence de la résistivité existe

pour $p < x$ et non pour $p = x$ dans le cas où il y a une bande d'impuretés bien définie.

5.2 Transport à champ nul ; $B = 0$

L'équation (4.75) pour la magnéto-conductivité que nous avons développée permet de calculer la contribution de chacune des directions de spin. Par contre, expérimentalement, c'est la résistivité totale de l'échantillon qui est mesurée, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de discrimination en fonction du spin. C'est pourquoi nous présentons ici la résistivité totale ($\rho = \frac{1}{\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow}}$), plutôt que les résultats pour les deux directions de spins. Les différents paramètres peuvent facilement être variés de façon théorique, alors qu'expérimentalement, il y a certaines difficultés. En effet, changer la température est relativement aisé, alors que la fraction d'impuretés et la densité de porteurs sont des quantités plutôt difficiles à contrôler. Pour chaque valeur de la proportion de Mn, il faut fabriquer un échantillon, ce qui est un long travail. Nos résultats sur la résistivité en fonction de la température sont donc les plus à même d'être comparés avec les données expérimentales, alors que les autres montrent plutôt comment le modèle se comporte lors de la variation de ces autres paramètres et aide aussi à guider les travaux expérimentaux.

5.2.1 Résistivité en fonction de la température

Comme nous l'avons vu dans la revue de la littérature, une transition métal-isolant est observée dans les DMS pour certaines concentrations d'impuretés. Les résultats de L. Thevenard *et al.* (Thevenard *et al.*, 2005) montrent que ce comportement dépendrait plutôt de la densité de porteurs présents. Plus de mesures sont nécessaires pour savoir si, pour des petites valeurs de x , une variation des

porteurs peut mener à plusieurs types de comportement. Les Figures 5.5, 5.6, 5.7 et 5.8 montrent ce que le modèle prédit pour la résistivité lorsque $E_M = 0$, pour différentes valeurs de la constante d'échange, de la densité de porteurs et ce, pour quatre concentrations différentes d'impuretés.

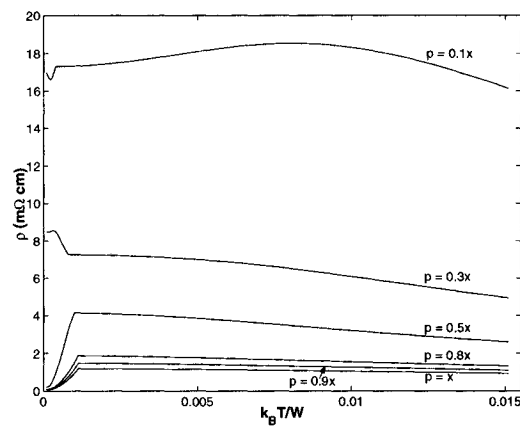
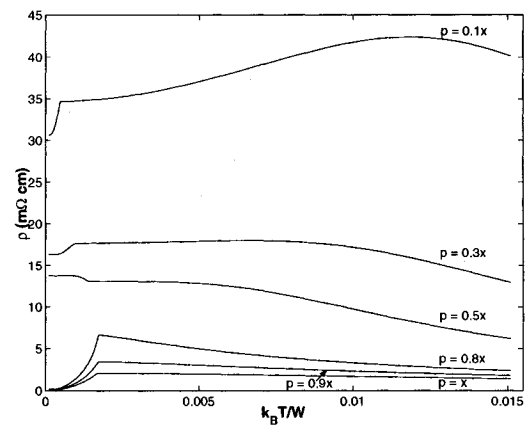
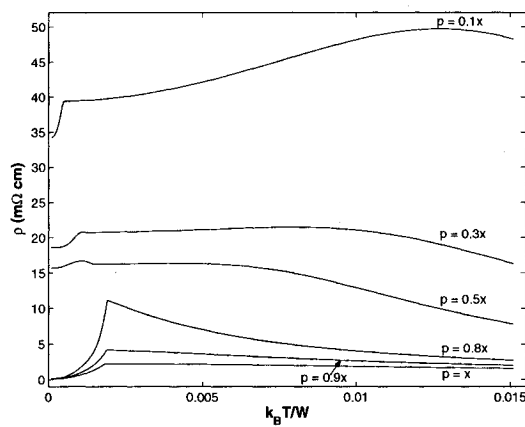
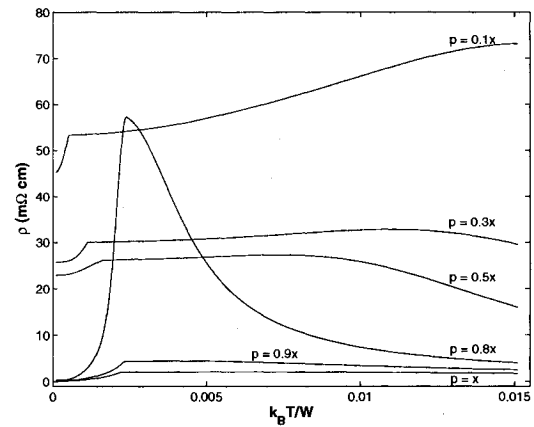
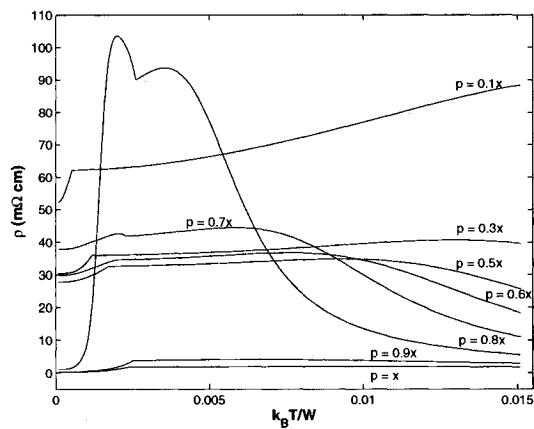
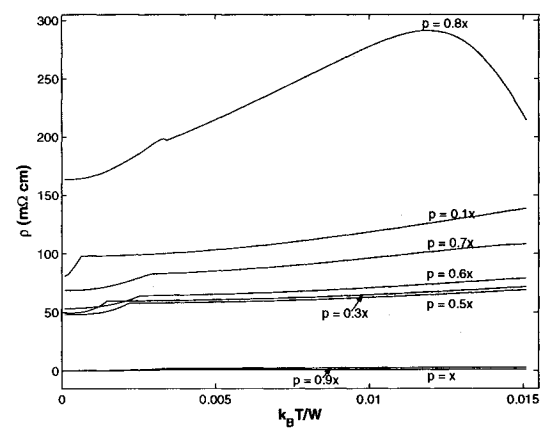
(a) $J_{pd} = 0, 3W$ (b) $J_{pd} = 0, 34W$ (c) $J_{pd} = 0, 35W$ (d) $J_{pd} = 0, 38W$ (e) $J_{pd} = 0, 4W$ (f) $J_{pd} = 0, 5W$

FIG. 5.5 Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,015$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$

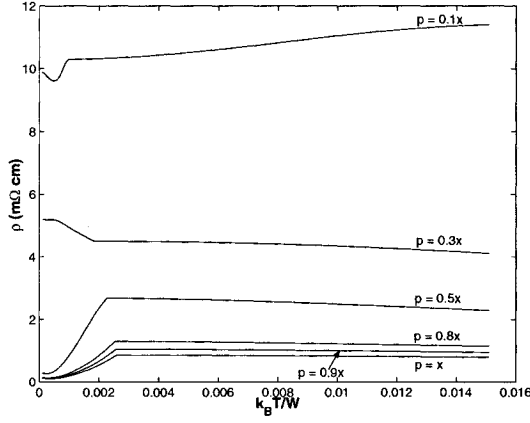
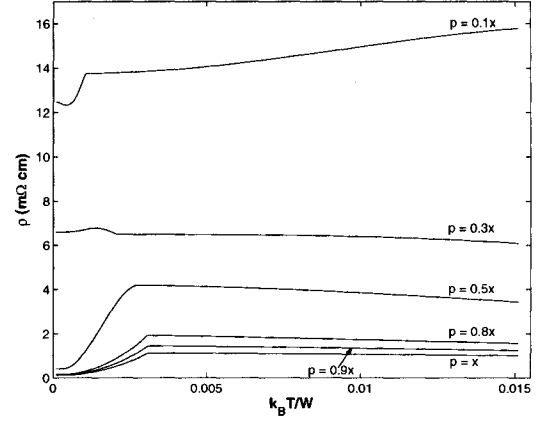
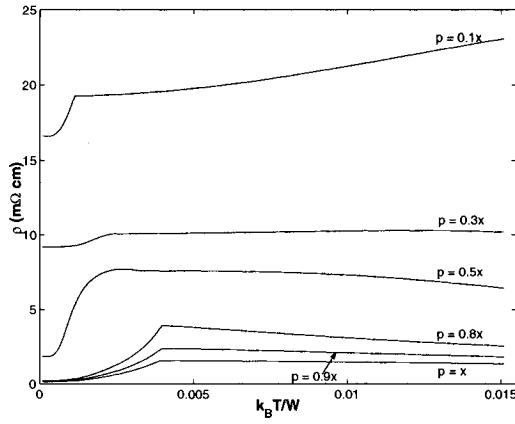
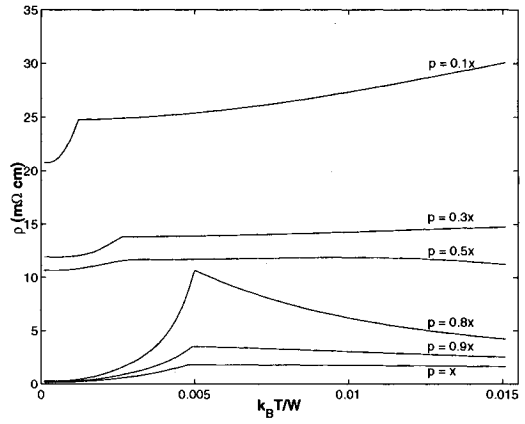
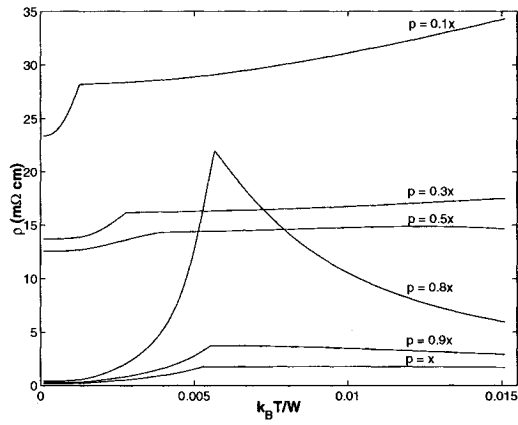
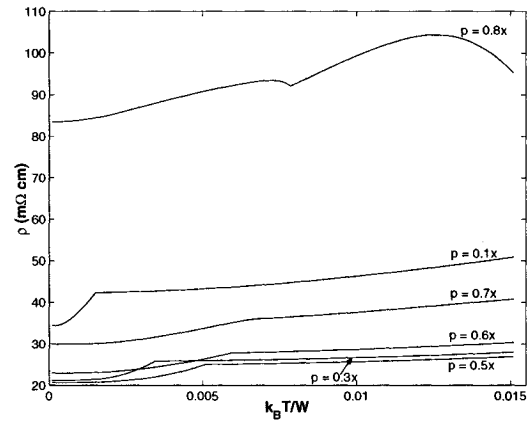
(a) $J_{pd} = 0,3W$ (b) $J_{pd} = 0,32W$ (c) $J_{pd} = 0,35W$ (d) $J_{pd} = 0,38W$ (e) $J_{pd} = 0,4W$ (f) $J_{pd} = 0,5W$

FIG. 5.6 Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,035$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$

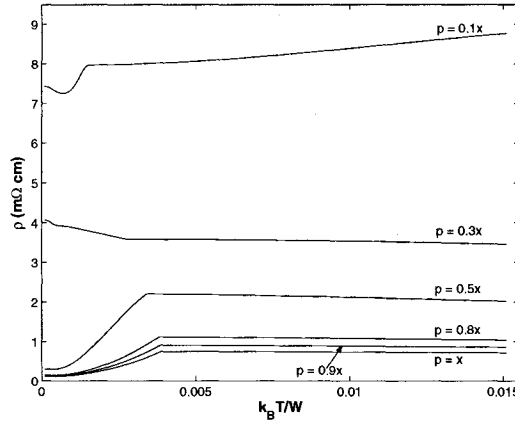
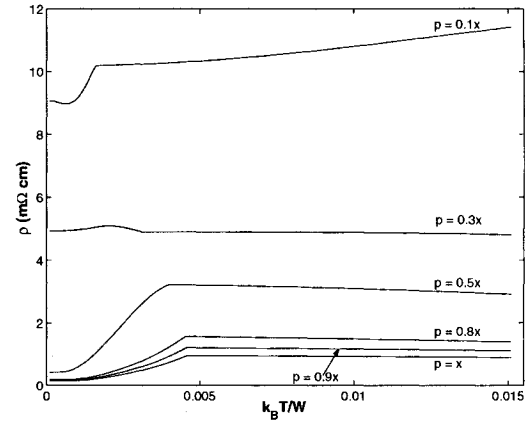
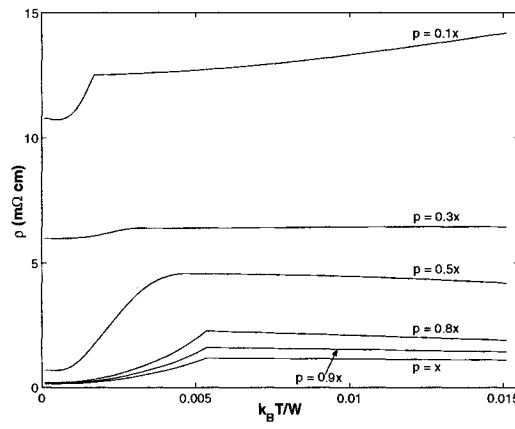
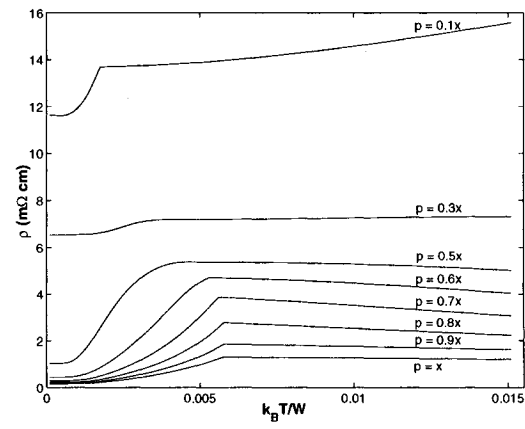
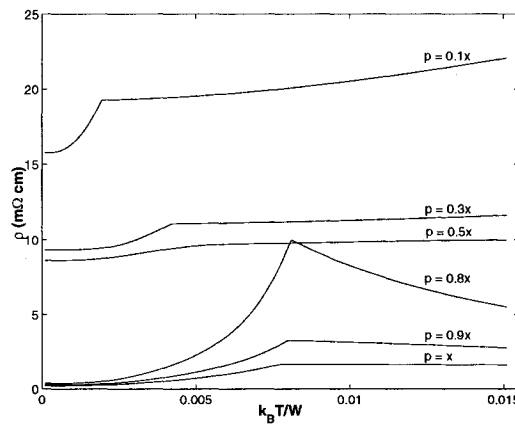
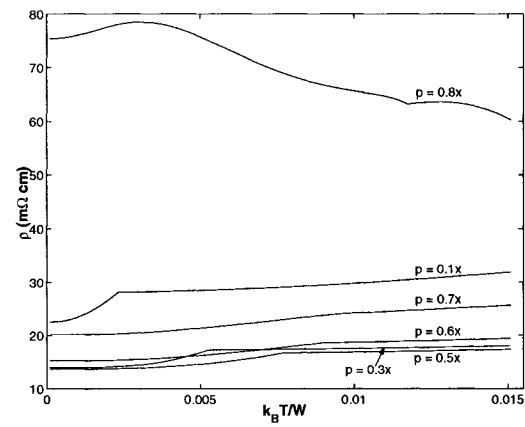
(a) $J_{pd} = 0,3W$ (b) $J_{pd} = 0,32W$ (c) $J_{pd} = 0,34W$ (d) $J_{pd} = 0,35W$ (e) $J_{pd} = 0,4W$ (f) $J_{pd} = 0,5W$

FIG. 5.7 Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$

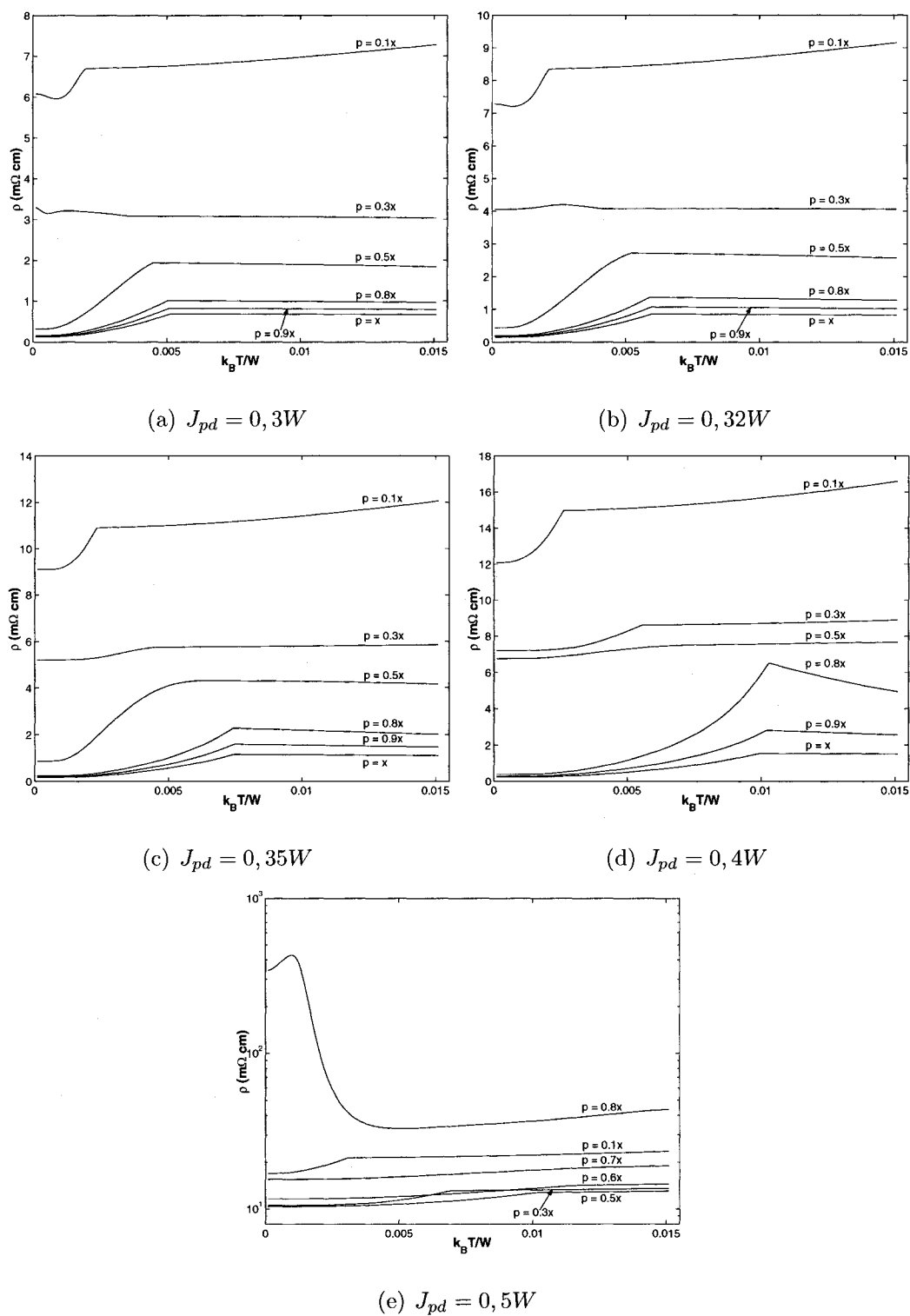


FIG. 5.8 Résistivité en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,07$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$

Ce que nous remarquons en premier lieu est la diversité de comportements de la résistivité en fonction de la température pour différents paramètres. Cela est dû à la grande influence de tous les paramètres du modèle qui, s'imbriquant ensemble, engendrent une variété dans les courbes de résistivité. Il faut tout de même remarquer qu'il existe une caractéristique commune peu importe x , p et J_{pd} : à la température de Curie T_c , il existe une transformation de la courbe de la résistivité.

Pour les DMS que nous désirons étudier, un certain type de variation en fonction de la température nous intéresse particulièrement, soit celui où le matériau est dans l'état métallique dans la région $T < T_c$ et isolant lorsque $T > T_c$ (mentionnons pour le lecteur qui serait confus par l'utilisation des termes état métallique et état isolant que nous faisons référence au signe de la pente que prend la résistivité en fonction de la température, positive pour métallique et négative pour isolant). La Figure 5.2 est un exemple d'évolution de la densité d'états pour un choix de paramètres nous donnant une transition métal-isolant de forme similaire aux résultats des mesures expérimentales de transport dans les DMS. Des Figures 5.5, 5.6, 5.7 et 5.8, nous voyons bien que la première condition pour obtenir le comportement voulu, est que la bande d'impuretés (états \downarrow à $T = 0$ et les deux directions de spin à $T > T_c$) chevauche la bande de valence, c'est-à-dire qu'il n'existe pas de bande interdite entre les états d'impuretés et ceux de valence du cristal parfait. Ceci survient lorsque la valeur de la constante d'échange J_{pd} (ou le duo (J_{pd}, E_M) si $E_M \neq 0$) représente un couplage intermédiaire. La deuxième exigence est d'avoir une densité de porteurs telle que la position du niveau de Fermi est autour (incluant directement dedans) de la pseudo-bande interdite, aussi petite soit-elle, avec la restriction que la bande des trous \uparrow soit faiblement peuplée à $T = 0$. La Figure 5.7(d) montre bien que la transition métal-isolant se produit pour plusieurs densités de trous avec E'_f autour de la pseudo-bande interdite. Dans le cas précis de la Figure 5.2 (Figure 5.7(e), $p = 0,8x$), le changement de résistivité entre $T = 0$

et $T = T_c$ est bien trop grand. Nous discutons de cela dans le chapitre suivant. Par contre, le mécanisme provoquant la transition métal-isolant dans notre modèle peut être expliqué en choisissant n'importe laquelle des courbes. Utilisons donc celle pour $p = 0,8x$ sur la Figure 5.7(e).

À très basse température, comme la densité de porteurs n'est pas très faible (voir la discussion après l'équation (4.131) de la Section 4.7.3.1), les densités d'états sont presque identiques à celle pour $T = 0$, alors la résistivité est à peu près constante. À $T = 0$, les spins de toutes les impuretés pointent dans la même direction et les porteurs voient un réseau ordonné dans l'espace du spin localisé. En principe, la conduction des porteurs \downarrow devrait être favorisée, mais les états qu'occupent ces porteurs sont modifiés par le désordre, alors que pour les porteurs \uparrow , l'équation (4.147) montre que c'est seulement à $E' > 0$ que ce changement se produit. Ainsi, à E'_f , les porteurs minoritaires (\uparrow) sont décrits par des fonctions de Bloch, ce qui leur donne une facilité de déplacement bien plus grande. Pour les porteurs majoritaires (\downarrow), tout dépend de la position exacte de l'énergie de Fermi. Si la densité est assez élevée, l'énergie de Fermi sera dans la bande de valence et plus la température augmente, plus les porteurs \downarrow sont mobiles, même s'ils se déplacent dans un réseau de spins localisés avec des directions de spin aléatoires. Si, par contre, la densité est assez élevée pour que E'_f soit dans la pseudo bande interdite, c'est-à-dire que les états des trous \downarrow dépendent fortement des impuretés, ce sont les interactions de spins qui dominent le transport. Puisque $\langle s^z \rangle$ diminue avec la température, l'aimantation des Mn s'affaiblit, ce qui augmente le taux de diffusion des trous \downarrow et, par conséquent, réduit la conductivité de la direction de spin majoritaire. Bien que la conductivité des trous majoritaires puisse augmenter ou diminuer avec la température lorsque $T < T_c$, selon le nombre de trous, comme nous venons de le voir, la contribution des trous minoritaires, bien que leur nombre soit moins élevé, est dominante. La résistivité présente un comportement métallique pour un couplage intermédiaire

avec un faible peuplement de la bande minoritaire à $T = 0$, dans le domaine $T < T_c$. Dans la phase paramagnétique, il n'y a plus d'effet magnétique ($D_{\uparrow}(E') = D_{\downarrow}(E')$) et la dépendance en température de la résistivité provient de $(-\frac{\partial f}{\partial E})$. À faible densité, même si la largeur de $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ augmente avec la température, la résistivité augmente. En effet, comme E'_f est près du bord de la bande dans ce cas, il existe une région où $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ est non nulle, mais où la densité d'états est nulle. Pour un nombre plus élevé de trous, toujours dans le cadre d'un couplage intermédiaire, de plus en plus d'états participent au transport avec l'augmentation de la température et, ainsi, la résistivité décroît. Lorsqu'il existe une bande d'impuretés bien séparée, une certaine région sans état (bande interdite) existe. Il peut donc y avoir plus d'un changement d'états (métallique ou isolant) de la résistivité avec l'augmentation de la température.

Notons que si nous utilisons des températures bien au-delà de T_c , plusieurs changements d'états peuvent apparaître étant donné que $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ est vraiment large. Cependant, à de telles températures, le matériau serait lui-même modifié et le modèle utilisé ici n'aurait plus aucune légitimité. Les comportements discutés précédemment pour $T > T_c$ sont valides pour des températures inférieures à une certaine valeur, laquelle est difficile à déterminer précisément, le modèle ne contenant pas de conditions propres définissant une limite en température à son applicabilité. La comparaison avec les données expérimentales est donc la seule façon d'établir un domaine de validité en température.

5.2.2 Résistivité en fonction de la densité de porteurs p

Nous étudions ici le comportement de la résistivité en fonction la densité de porteurs. La Figure 5.9 présente le cas où la température est nulle.

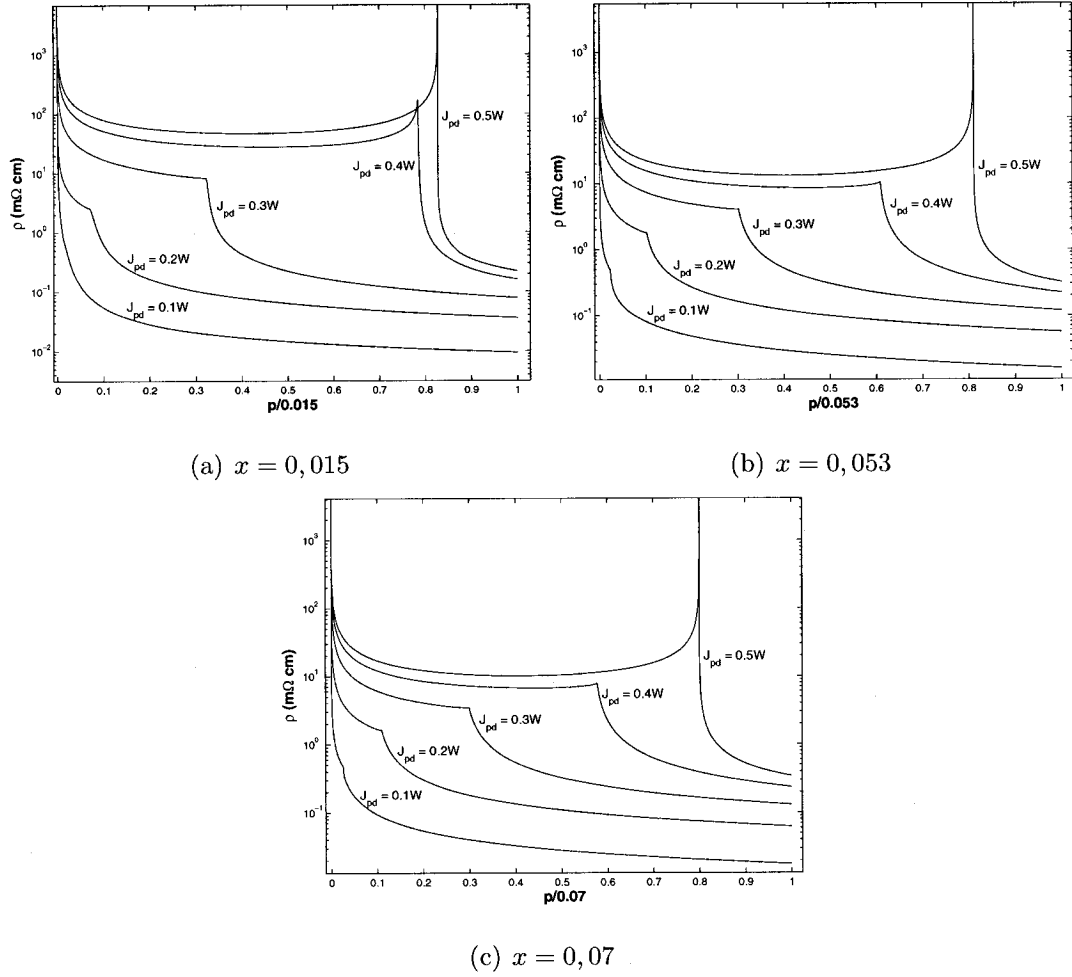


FIG. 5.9 Résistivité en fonction de la densité de trous pour $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

Évidemment, lorsque la densité de trous se rapproche de zéro ($p \rightarrow 0$), la résistivité tend vers une valeur infinie ($\rho \rightarrow \infty$), puisque que l'absence de porteurs dans le système rend le transport électrique impossible. Nous remarquons que lorsque l'échange J_{pd} devient suffisamment élevée pour qu'une bande d'impuretés soit bien séparée de la bande de valence, il existe une deuxième valeur de la densité de trous n_{BI} correspondant à la bande d'impuretés remplie (qui n'est pas égale à x , voir section 5.1.2.1), pour laquelle la résistivité devient infinie. Ceci s'explique simple-

ment en se rappelant qu'à $T = 0$, le transport dépend strictement de l'énergie de Fermi, c'est-à-dire que $\rho(T = 0) = \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)_{T=0} \rho(E) = \rho(E_f)$. Quand la bande d'impuretés est pleine et que celle de valence est vide, l'énergie de Fermi se situe exactement dans la bande interdite, revenant au même que s'il n'y avait aucun porteurs dans le système.

La Figure 5.9 montre aussi que, pour une certaine valeur de p , il y a un changement dans la forme de la résistivité. À $T = 0$, tous les spins localisés pointent dans la même direction et ont la même valeur, soit $S\hat{z}$. Il y a ainsi nécessairement une différence entre les densités d'états des trous \uparrow et \downarrow , peu importe leur nombre, comme discuté dans la section 4.7.3.1. De plus, comme nous pouvons le voir par exemple sur les Figures 5.1, 5.2 et 5.3, il existe un certain domaine, dans les énergies négatives, où il n'y a que des états \downarrow . Aussi longtemps que la densité de trous est telle que l'énergie de Fermi se situe dans cette région, tous les porteurs ont la même polarisation et la résistivité suit le comportement propre à ces trous \downarrow . Au moment où l'énergie de Fermi franchit le bord de bande des porteurs \uparrow , il y a début de peuplement de cette direction et la résistivité devient un mélange des comportements associés aux spins \uparrow et \downarrow . Ceci explique le changement de forme de la résistivité sur la Figure 5.9. Le domaine d'énergie pour lequel la densité d'états \uparrow ($D_{\uparrow}(E')$) est nulle existe peu importe la valeur de J_{pd} pour $x \neq 0$. Plus J_{pd} et x sont petits, plus la transition se produit à une valeur p faible et plus la différence de comportement est atténuée, ce qui est bien montré par la courbe de la résistivité pour $J_{pd} = 0, 1W$ et $x = 0.015$ (Figure 5.9(a)).

Attardons-nous finalement à la forme des courbes de résistivité pour $T = 0$. Nous pouvons séparer les comportements possibles en trois catégories, selon la valeur de J_{pd} : couplage faible où la densité d'états des trous \downarrow est faiblement modifiée aux bords de bande, couplage intermédiaire où la modification aux bords de bandes

amène l'apparition d'une pseudo-bande interdite et couplage fort où il existe une bande d'impuretés bien séparée. Dans le premier cas (voir la Figure 5.1(a) pour un exemple ; notons quand même qu'à ce J_{pd} , nous sommes entre la fin du couplage faible et le début du couplage intermédiaire), le nombre d'états (densité d'états totale) augmente toujours jusqu'à $E' = 0$. Comme la quantité d'états disponibles à l'énergie de Fermi augmente, étant donné que le nombre de trous n'est jamais assez élevé pour que $E'_f = 0$, la résistivité va décroître avec p . Pour un couplage intermédiaire, il apparaît une pseudo-bande interdite dans $D_1(E')$ (voir Figure 5.2(a) pour un exemple), ce qui se traduit par l'existence, dans la densité d'états totale, d'une région dans les énergies négatives où le nombre d'états diminue avec l'énergie croissante, pour ensuite recommencer à augmenter. Les courbes pour $J_{pd} = 0, 4W$ sont des exemples de ce comportement. La résistivité commence par diminuer en fonction de p et, lorsque E'_f est dans la région où le nombre d'états diminue, la résistivité augmente avec p pour ensuite recommencer à diminuer lorsque l'énergie de Fermi est de nouveau dans une région où le nombre d'états augmente avec l'énergie. Pour le dernier cas, celui du couplage fort (voir Figure 5.3(a) pour un exemple), la résistivité diminue avec p au début, puisque l'énergie de Fermi se situe dans la première moitié de la bande d'impuretés, où le nombre d'états augmente avec l'énergie. La densité d'états de la bande d'impuretés contient un maximum et ainsi, lorsque E'_f dépasse la position de ce maximum, la résistivité va se mettre à augmenter avec p jusqu'à ce que la bande d'impuretés devienne pleine, où $\rho \rightarrow \infty$. À partir de ce moment, E'_f va passer dans la bande de valence, où le nombre d'états augmente et devient rapidement plus grand que celui au maximum de la bande d'impuretés, amenant une diminution importante de la résistivité avec p par rapport au minimum atteint lorsque l'énergie de Fermi était encore dans la bande d'impuretés.

Regardons maintenant l'effet d'une température non nulle sur le système. Pour ce

faire, nous choisissons une température $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$ et une fraction d'impuretés $x = 0,053$. Comme nous le voyons sur la Figure 5.7, pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, le système n'est pas dans un état unique, c'est-à-dire que le matériau peut être soit ferromagnétique, soit paramagnétique selon couple (J_{pd}, p) choisi. La Figure 5.10 présente les résultats de la résistivité en fonction de p dans ces conditions.

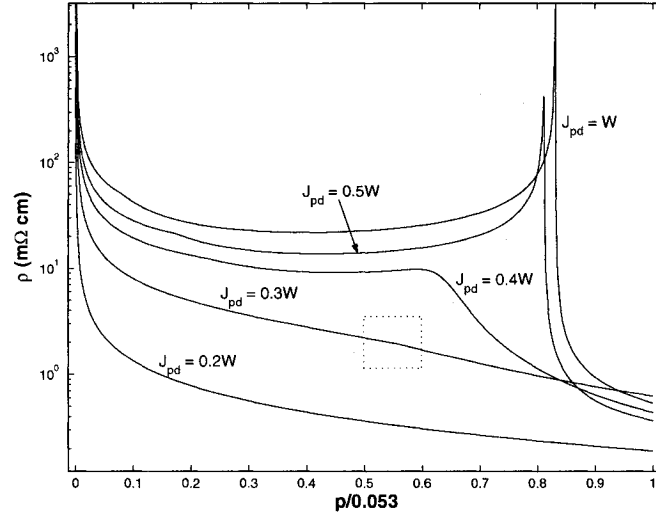


FIG. 5.10 Résistivité en fonction de la densité de trous pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$. Le carré pointillé montre la valeur de p pour laquelle le système avec $J_{pd} = 0,3W$ subit une transition magnétique.

Ici, pour $J_{pd} = 0,5W$, la résistivité ne tend pas vers l'infini pour deux valeurs comme dans le cas où $T = 0$. Comme la bande interdite n'est pas très grande à $J_{pd} = 0,5W$, $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ permet d'aller chercher des états de chaque côté de celle-ci, ce qui mène à une résistivité finie pour tous $p \neq 0$. Pour que $\rho \rightarrow \infty$ lorsque la bande d'impuretés devient pleine, il faut que la bande interdite soit assez large pour que $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ soit nulle aux énergies se situant de part et d'autre de la bande interdite. Nous pouvons remarquer que c'est le cas pour $J_{pd} = W$.

Pour $J_{pd} = 0,3W$, $J_{pd} = 0,4W$, $J_{pd} = 0,5W$ et $J_{pd} = W$, il y a une caractéristique très subtile dans les courbes. En effet, comme déjà mentionné, pour ces constantes d'échange, l'état dépend du couple (J_{pd}, p) . Ainsi, pour chacune de ces courbes, il existe une région ferromagnétique et une autre paramagnétique. La transition produit un changement très faible dans l'allure de la résistivité. Un carré pointillé montre ce changement pour $J_{pd} = 0,3W$ sur la Figure 5.10. Pour $J_{pd} = 0,2W$, le système est paramagnétique pour toutes les densités de trous et donc, la densité d'états totale est toujours $D(E') = 2D_{\uparrow}(E') = 2D_{\downarrow}(E')$, ce qui se traduit par une résistivité monotone qui décroît sans changements de forme.

5.2.3 Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés x

Après avoir étudié la résistivité pour des températures et des densités de trous variables, nous en sommes maintenant au point de présenter les résultats en fonction de la fraction d'impuretés, alors que la température et la densité de trous sont gardées constantes. Les Figures 5.11 et 5.12 montrent la résistivité pour $k_B T = 0$ et $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, et ce pour plusieurs valeurs de J_{pd} et de p .

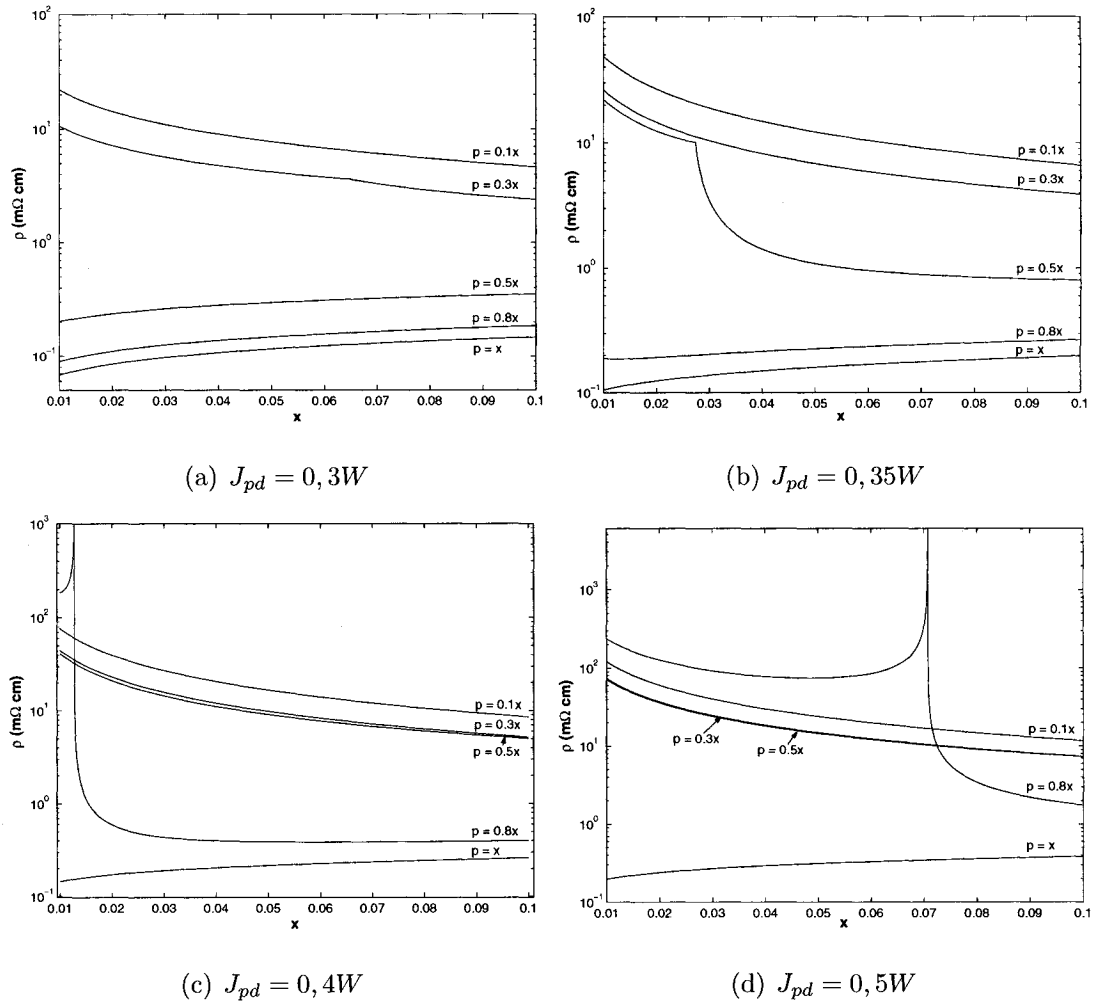


FIG. 5.11 Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

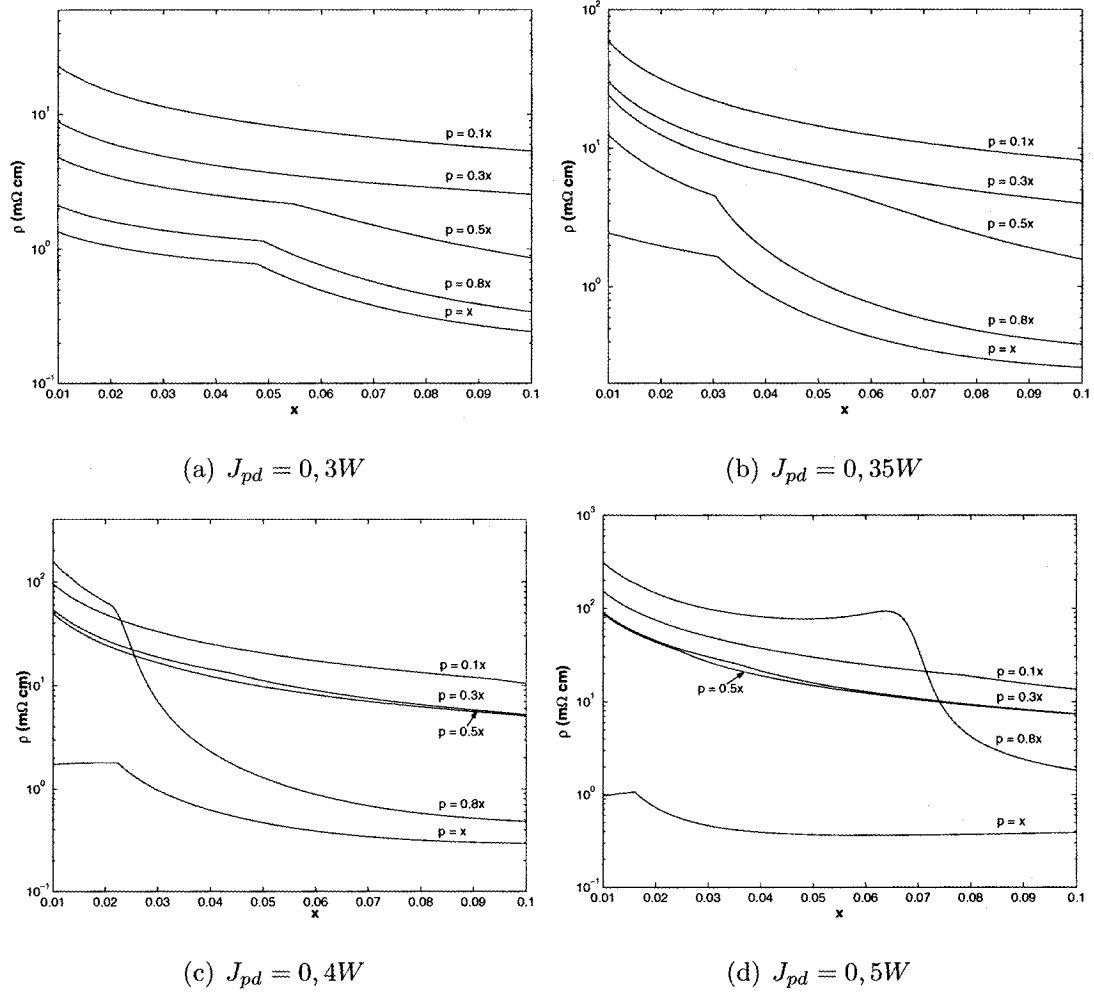


FIG. 5.12 Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

Dans le cas présent, il est difficile d'expliquer les divers comportements en suivant l'évolution de la densité d'états, puisque celle-ci change à chacune des valeurs de x pour $T = 0$ et pour chaque couple de valeurs (x, p) pour $T \neq 0$. Par ailleurs, les positions des niveaux d'impuretés ne dépendent pas de x , mais seulement de J_{pd} et de E_M , comme nous l'avons vu aux équations (4.147), (4.152) et (4.153). Par contre, si J_{pd} est tel que (4.153) prédit un niveau bien séparé, mais près, de la

bande de valence, la valeur de x détermine si $D_1(E')$ présente une pseudo ou une vraie bande interdite. Ceci est une difficulté de plus dans l'analyse de nos résultats, car nous n'avons pas utilisé de J_{pd} très élevés. Puisqu'un ion Mn se place à environ 113 meV au dessus de la bande de valence, la position E'_p (4.156) par rapport à $E' = -1$ est entre 0,0565 et 0,0226, considérant que la demi-largeur de la bande des trous lourds du cristal parfait est entre 2 et 5 eV. Nous savons donc que la valeur de J_{pd} ne peut être vraiment grande, et c'est pourquoi nous nous sommes limités à une valeur maximale de $J_{pd} = 0,5W$.

À $T = 0$, pour les quatre valeurs de J_{pd} , la résistivité pour les densités de trous 0, 1 x et 0,3 x décroît avec x . Pour $J_{pd} = 0,3W$ et $p = 0,3x$ (Figure 5.11(a)), contrairement aux trois autres valeurs de la constante d'échange, il y a deux régions dans la courbe décroissante de la résistivité. À cette valeur de J_{pd} , les densités d'états ressemblent, pour tous x , à celles de la Figure 5.1(a). Pour une partie des valeurs de x , l'énergie de Fermi, déterminée par la densité de porteurs (une fraction de x), se situe dans la partie où il n'y a que des états \downarrow . À partir d'une valeur particulière de x (autour de 0.065 dans ce cas), il commence à y avoir des trous de spin \uparrow et la résistivité, bien que continuant à décroître, change de forme. Le même effet se produit, avec une amplitude encore plus grande, pour $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,5x$ (Figure 5.11(b)). Pour la densité $p = x$, nous retrouvons une augmentation de la résistivité pour tous les J_{pd} choisis. Un phénomène très intéressant peut se produire pour les deux valeurs les plus élevées de la constante d'échange (Figures 5.11(c) et 5.11(d)). En effet, pour certaines valeurs de x , une bande d'impuretés bien séparée peut apparaître et, si la densité de porteurs est telle que E'_f est dans la bande interdite, la résistivité a une valeur infinie. Pour $k_B T = 3,5 \times 10^{-3}W$ (Figure 5.12), les bandes interdites que nous pouvons obtenir avec $J_{pd} = 0,4W$ et $J_{pd} = 0,5W$ ne sont jamais assez larges pour empêcher $(-\frac{\partial f}{\partial E})$ d'aller chercher des états de part et d'autre, alors ce phénomène ne se produit pas.

Pour terminer cette partie, nous avons effectué le calcul de la résistivité en fonction de la fraction d'impuretés, mais en fixant la densité de trous à une valeur unique pour tous les x , contrairement aux courbes présentées sur les Figures 5.11 et 5.12. Comme la fraction inférieure que nous utilisons est $x = 0,01$, p ne peut dépasser 0,01 et c'est précisément le chiffre que nous utilisons (le choix est arbitraire). Dans ces calculs, il y a autant de trous que d'impuretés à $x = 0,01$ alors que ce nombre tombe à seulement 10% de la quantité de Mn pour $x = 0,1$. Les Figures 5.13 et 5.14 présentent les résultats pour $k_B T = 0$ et $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$.

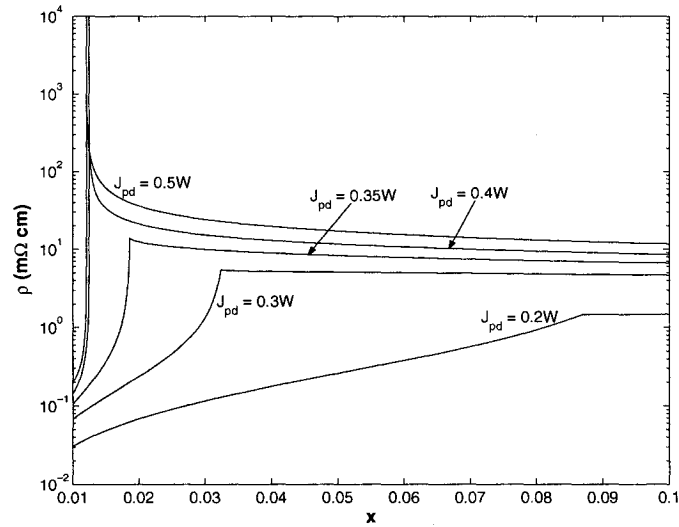


FIG. 5.13 Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour une densité de trous fixe $p = 0,01$ avec $k_B T = 0$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

À $T = 0$, pour des valeurs de x semblables, la résistivité devient infinie pour $J_{pd} = 0,4W$ et $0,5W$. La température de $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$ a pour effet de rendre la conductivité finie pour tout x à $J_{pd} = 0,4W$ et d'éliminer les transitions de comportement drastiques pour $J_{pd} = 0,2W$, $J_{pd} = 0,3W$ et $J_{pd} = 0,35W$.

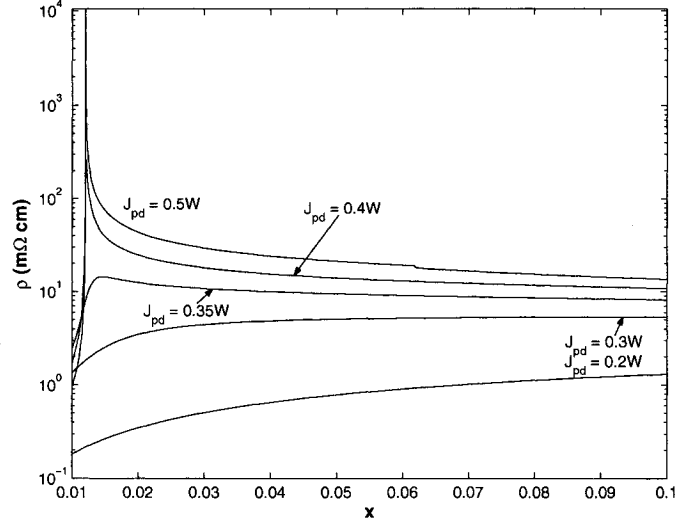


FIG. 5.14 Résistivité en fonction de la fraction d'impuretés pour une densité de trous fixe $p = 0,01$ avec $k_B T = 3,5 \times 10^{-3} W$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 0$.

5.3 Transport sous champ magnétique ($B \neq 0$)

Nous présentons ici des résultats lorsqu'un champ magnétique externe, perpendiculaire à la direction du courant, est appliqué sur le système. Il est important de noter que pour un matériau soumis à un champ magnétique qui, sous une certaine température T_c , devient ferromagnétique, l'état du système qui sera mesuré est tributaire d'un choix fait par l'expérimenteur. Par exemple, si un échantillon paramagnétique est refroidi jusqu'à une certaine température, inférieure à T_c , puis qu'un champ magnétique est appliqué, les propriétés de transport obtenues seront en général, différentes de celles mesurées si le champ est appliqué dans l'état paramagnétique avant d'abaisser la température. Il est donc très important de spécifier quelles sont les hypothèses considérées lorsqu'un calcul théorique à champ non nul est présenté. Nous devons être prudents, puisque, dans notre modèle, le choix de la valeur d'essai $[\langle p_\uparrow \rangle - \langle p_\downarrow \rangle]_0$ pour le calcul auto-cohérent explicité à la section 4.7.4

peut déterminer la direction de spin que le calcul convergé adoptera, même si, *a priori*, une quantité physique ne dépend pas de la valeur d'essai. En regardant l'équation (4.114), qui donne la probabilité que la valeur d'un spin localisé ait une valeur S^z ,

$$P(S^z) = \frac{e^{-\beta\left(\frac{J_{pd}}{2}[\langle p_{m\uparrow}\rangle - \langle p_{m\downarrow}\rangle] - 2\mu_B B_m\right)S^z}}{\sum_{S^z} e^{-\beta\left(\frac{J_{pd}}{2}[\langle p_{m\uparrow}\rangle - \langle p_{m\downarrow}\rangle] - 2\mu_B B_m\right)S^z}}, \quad (5.9)$$

nous remarquons que si nous ne sommes pas dans l'état paramagnétique et que la densité de porteurs $p = \langle p_{\uparrow}\rangle + \langle p_{\downarrow}\rangle$ est assez élevée pour avoir $\frac{J_{pd}}{2} [\langle p_{m\uparrow}\rangle - \langle p_{m\downarrow}\rangle]$ dominant par rapport à $2\mu_B B_m$, le choix de la valeur d'essai va déterminer la direction de spin du système une fois la convergence atteinte. Nous discutons donc, dans chacune des sous-sections suivante, du choix de la valeur de départ.

5.3.1 Coefficients du transport en fonction de la température

Commençons par étudier le comportement du coefficient de Hall en fonction de la température. Si le calcul est effectué à partir des basses températures, le choix de $[\langle p_{\uparrow}\rangle - \langle p_{\downarrow}\rangle]_0$ peut déterminer l'état de spin du système, mais nous ne savons pas *a priori* quel est le bon. Pour pallier à cela, nous avons adopté l'approche suivante : la première valeur est calculée pour une température bien au-dessus de la température de Curie et les subséquentes sont obtenues en abaissant la température. De cette manière la direction de spin du système est déterminée par le champ magnétique. Si nous appliquons le champ vers les z positifs, les spins des porteurs et des Mn vont tendre à s'aligner avec le champ, mais, en même temps, les deux types de spin interagissent de façon anti-ferromagnétique. Comme le spin des ions est plus grand, il interagit plus fortement avec le champ que celui des porteurs, et ainsi, la direction de polarisation des porteurs est opposée à celle du champ. Quand la température devient inférieure à T_c , la polarisation conserve la même direction et $\langle s^z \rangle$ est dans le sens inverse du champ pour tout T . Notre théorie étant isotrope

($|\langle s^z \rangle|_{B_{\text{positif}}} = |\langle s^z \rangle|_{B_{\text{négatif}}}$), ce qui, d'après l'équation du coefficient de Hall (4.79), indique que R_H est indépendant de la direction du champ si le calcul se fait à partir d'une température élevée vers les basses températures.

Les Figure 5.15, 5.16 et 5.17 présentent les résultats de notre modèle pour le coefficient de Hall lorsque $E_M = 0$ et $x = 0,053$, pour différentes valeurs de la constante d'échange, de la densité de porteurs et pour trois valeurs de champs magnétiques.

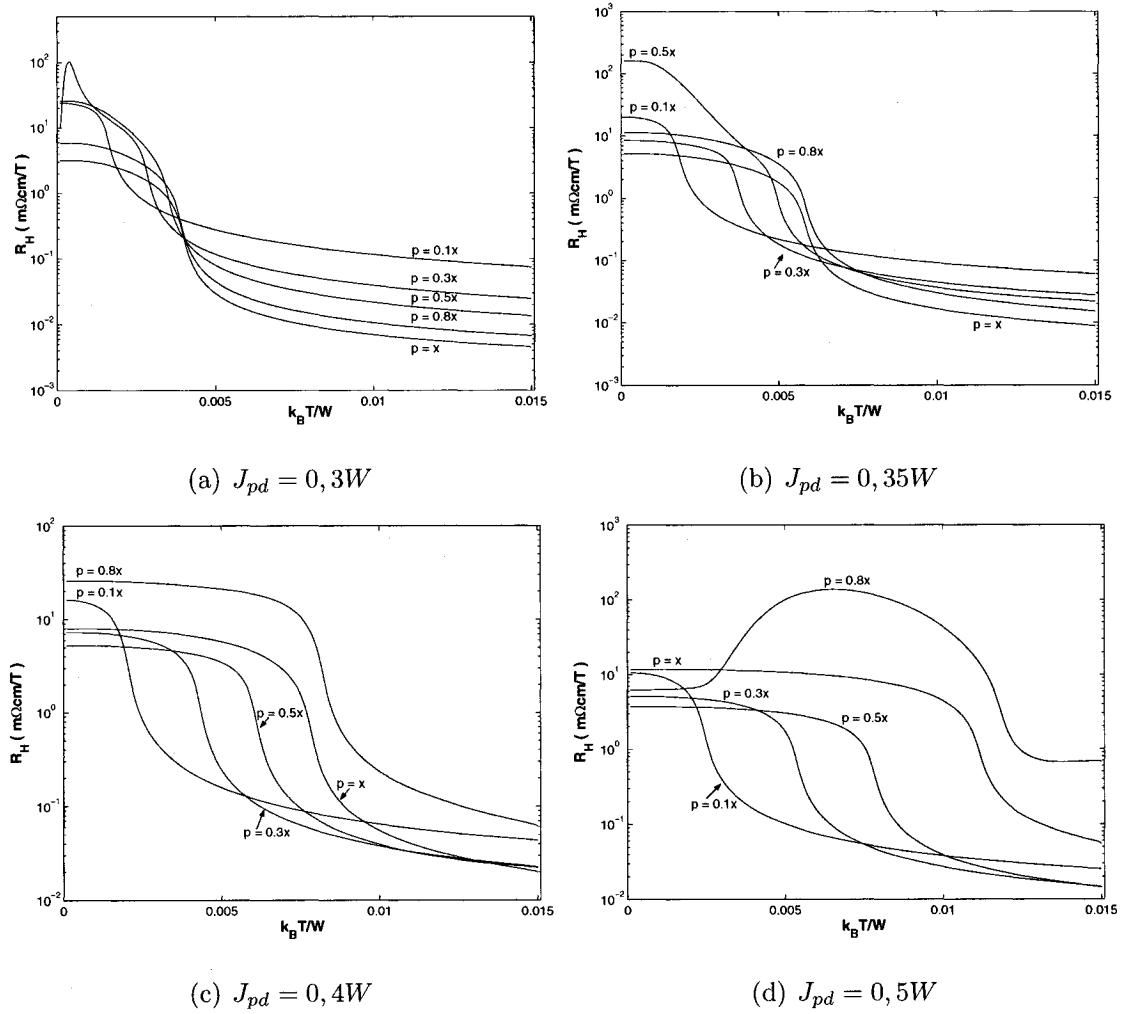


FIG. 5.15 Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 1 \times 10^{-5} W$

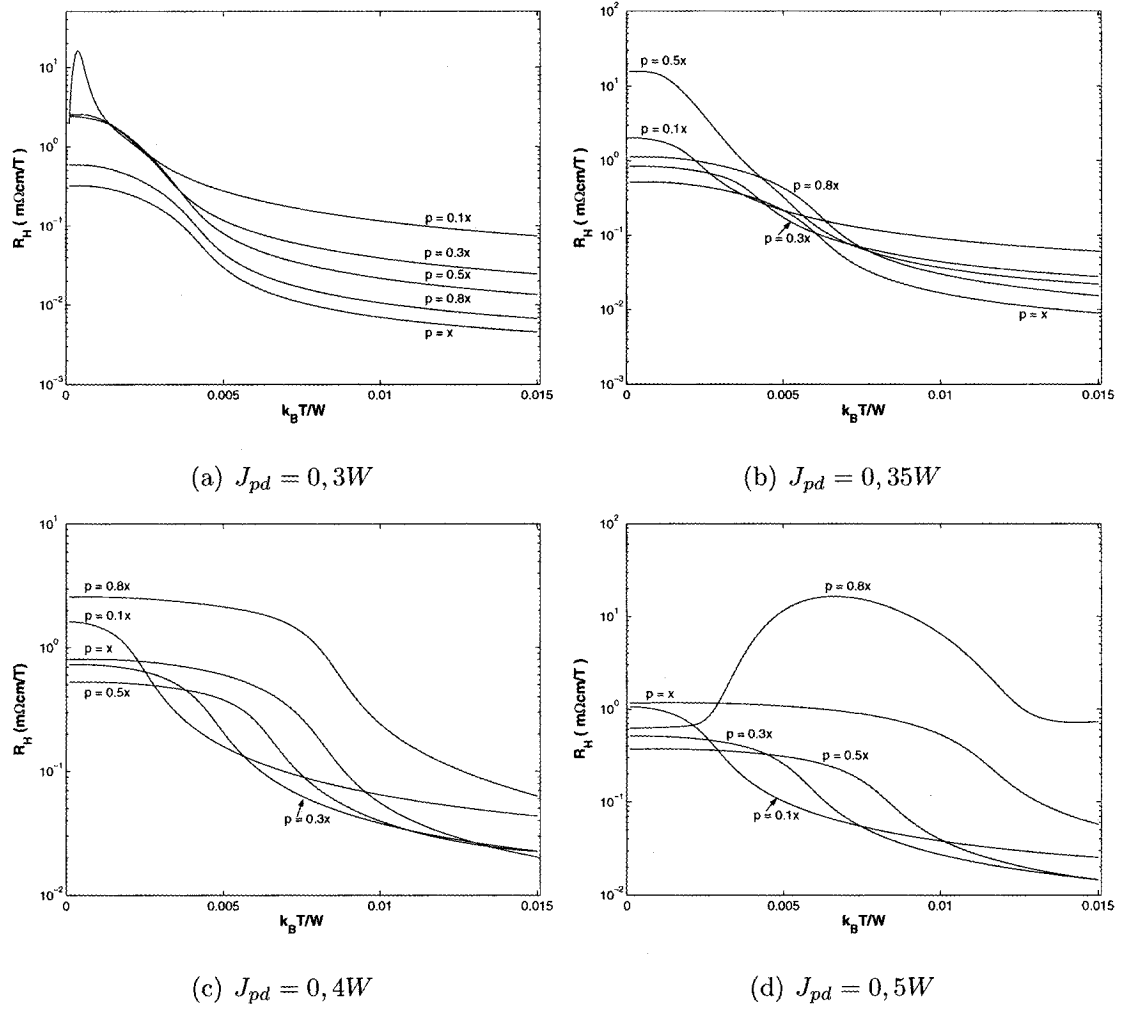


FIG. 5.16 Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 1 \times 10^{-4} W$

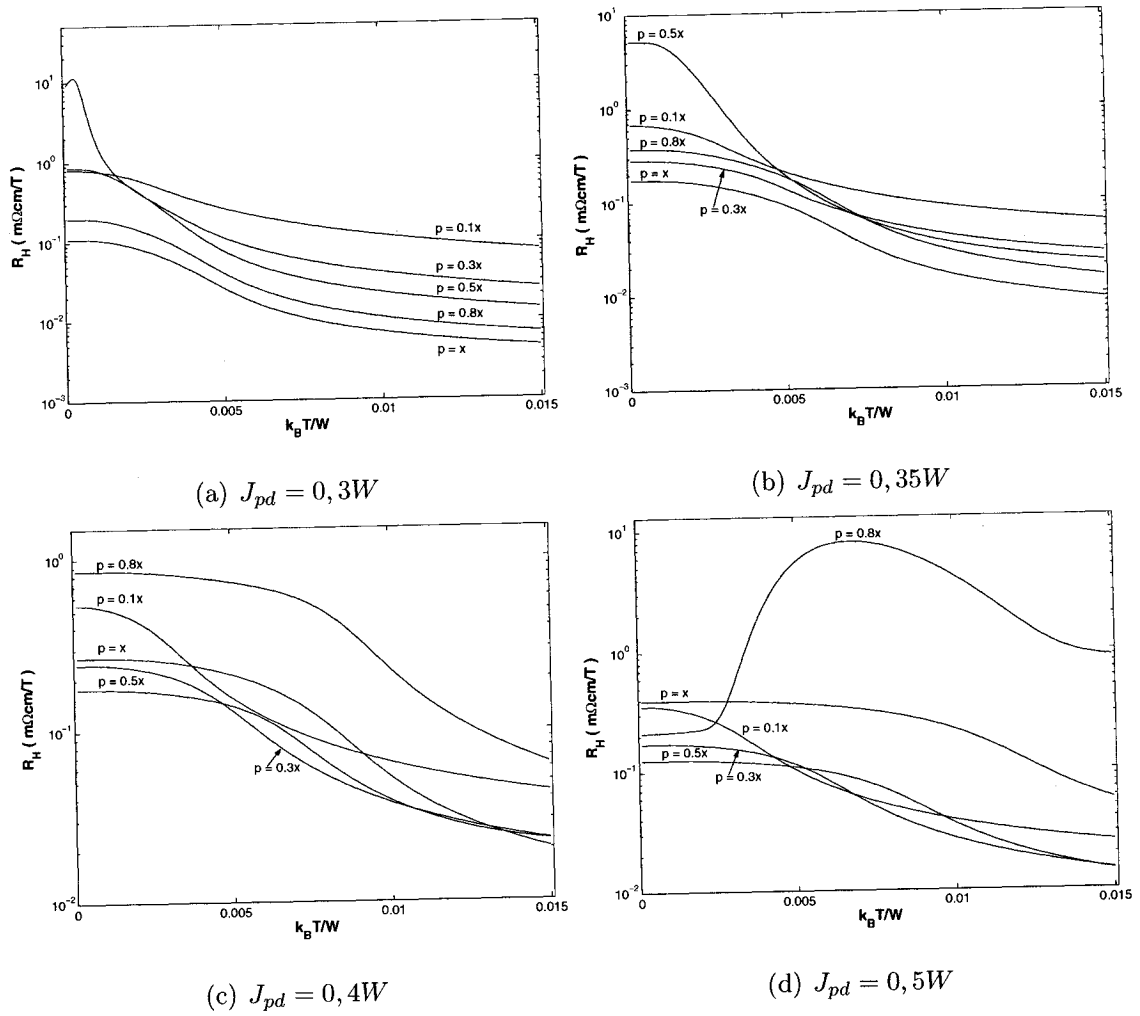


FIG. 5.17 Coefficient de Hall en fonction de la température pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $\mu_B B = 3 \times 10^{-4} W$

Contrairement aux courbes de résistivité à $B = 0$, il n'est pas très intuitif d'expliquer le comportement des courbes de R_H à l'aide de la densité d'états. Nous allons donc nous contenter de comparer nos résultats avec les données expérimentales dans la discussion. Nous pouvons quand même mentionner deux observations. Les courbes pour les couples $(J_{pd} = 0,3W, p = 0,3x)$ et $(J_{pd} = 0,5W, p = 0,8x)$ présentent des comportements bien différents des autres. Pour $J_{pd} = 0,5W$, c'est

évidemment dû au fait qu'il existe une bande d'impuretés bien séparés et qu'à $p = 0,8x$, l'énergie de Fermi se situe dans les états d'impuretés, mais proche de la bande interdite. Pour $(J_{pd} = 0,3W, p = 0,3x)$, nous remarquons que cela est consistant avec le fait que la résistivité en fonction de la température à champ nul présentait aussi un comportement atypique pour ce couple précis.

La Figure 5.18 présente deux exemples de la modification de la résistivité en fonction de la température lorsqu'un champ magnétique est appliqué. Nous remarquons bien que le champ peut avoir un effet relativement important sur la résistivité et que la température de transition métal-isolant ($\approx T_c$), pour la Figure 5.18(b), augmente avec le champ.

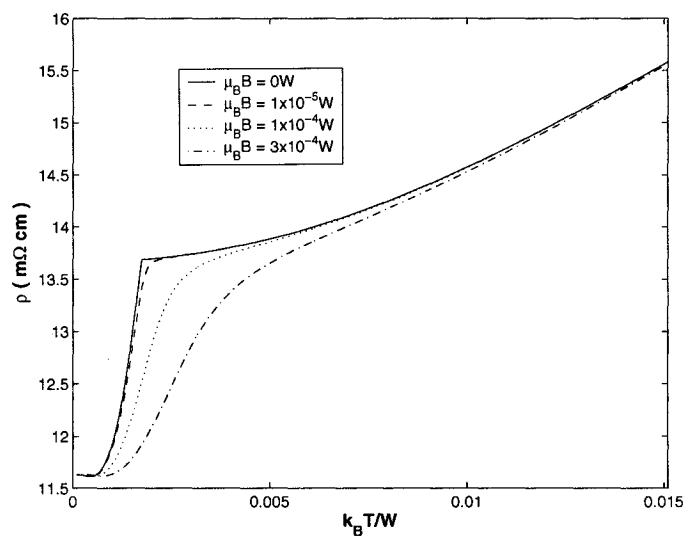
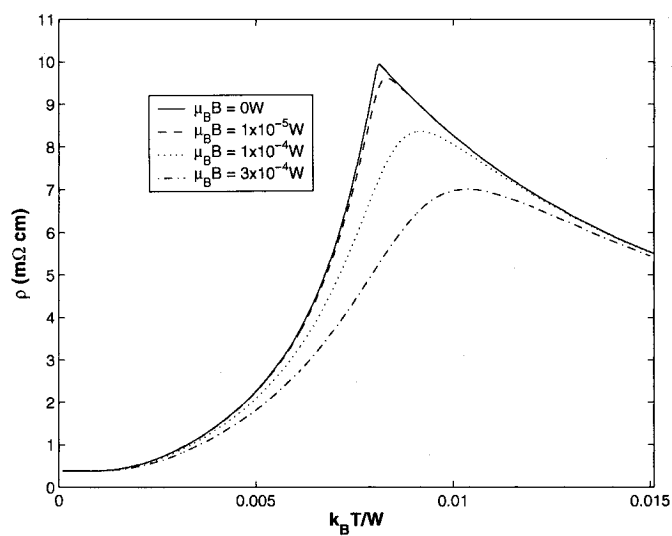
(a) $J_{pd} = 0,35W$, $p = 0.1x$ (b) $J_{pd} = 0,4W$, $p = 0.8x$

FIG. 5.18 Résistivité en fonction de la température pour différents champs magnétiques pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$ et $E_M = 0$

5.3.2 Coefficients du transport en fonction du champ magnétique

Nous allons maintenant fixer la température et regarder comment les coefficients du transport évoluent en fonction du champ magnétique appliqué. La magnéto-résistivité est premièrement présentée, suivie de la résistivité de Hall.

5.3.2.1 Magnéto-résistivité

Définie par l'équation (6), la magnéto-résistivité MR représente le pourcentage de déviation de la résistivité à champ magnétique non nul par rapport à celle à champ nul. Une valeur positive de MR indique donc que le champ rend le matériau plus résistant au courant.

Nous avons choisi comme condition pour les calculs que l'aimantation des spins localisés soit dans la même direction que le champ B_z^0 . Les Figures 5.19, 5.20, 5.21 et 5.22 présentent la magnéto-résistivité lorsque $E_M = 0$ et $x = 0,053$, pour différentes valeurs de constante d'échange, de densité de porteurs et de température. La déviation entre le cas avec et sans champ est au maximum d'environ 55%. Encore une fois, les couples ($J_{pd} = 0,3W, p = 0,3x$) et ($J_{pd} = 0,5W, p = 0,8x$) présentent des comportements différents des autres. À basse température et à densité de porteurs faible, sauf pour $J_{pd} = 0,5W$ (voir Figure 5.22), nous remarquons que la magnéto-résistivité est positive, c'est-à-dire que même si les spins localisés sont bien alignés, le champ magnétique rend le système plus résistant au passage du courant. Pour la Figure 5.22 dans son ensemble, la variation générale de MR est différente que ce qui est observé sur les Figures 5.19, 5.20 et 5.21, étant donné qu'il y a une vraie bande d'impuretés pour $J_{pd} = 0,5W$.

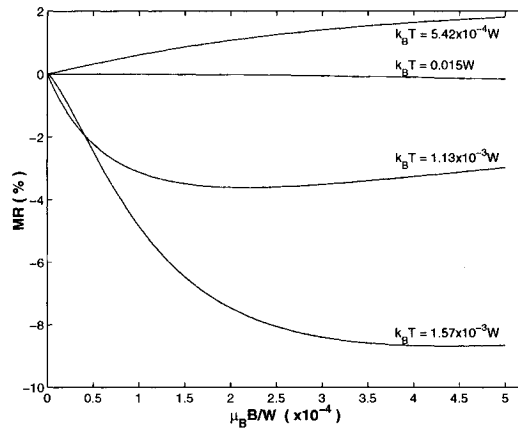
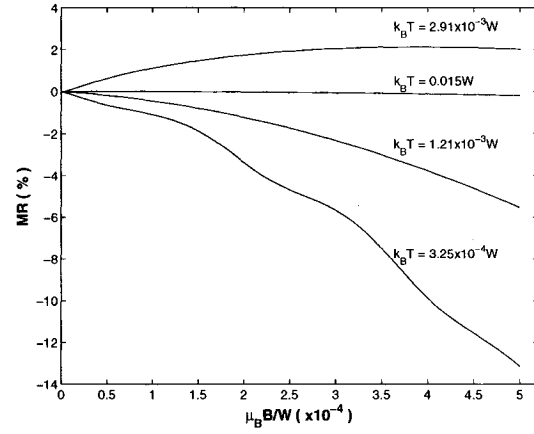
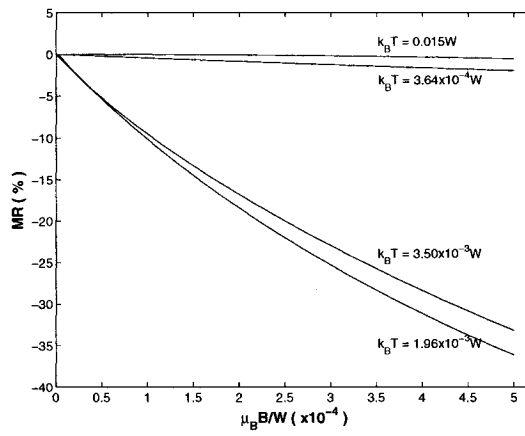
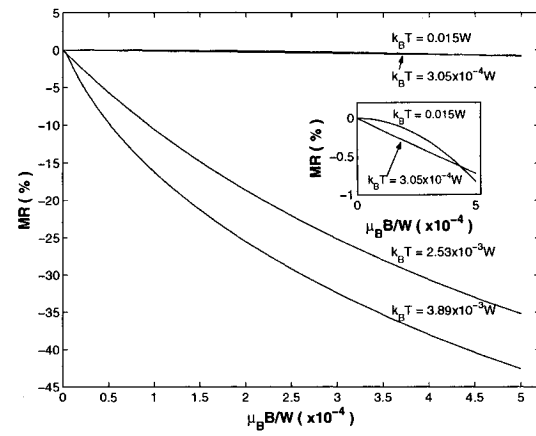
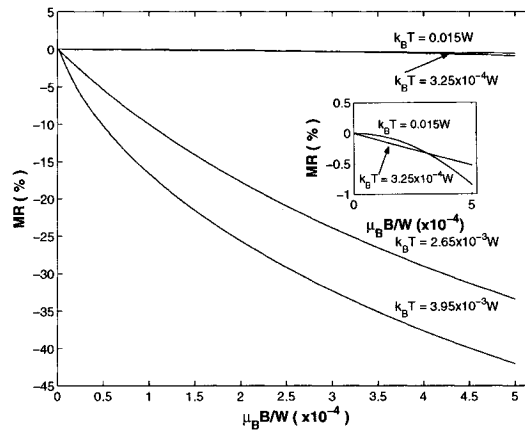
(a) $p = 0,1x$ (b) $p = 0,3x$ (c) $p = 0,5x$ (d) $p = 0,8x$ (e) $p = x$

FIG. 5.19 Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,3W$

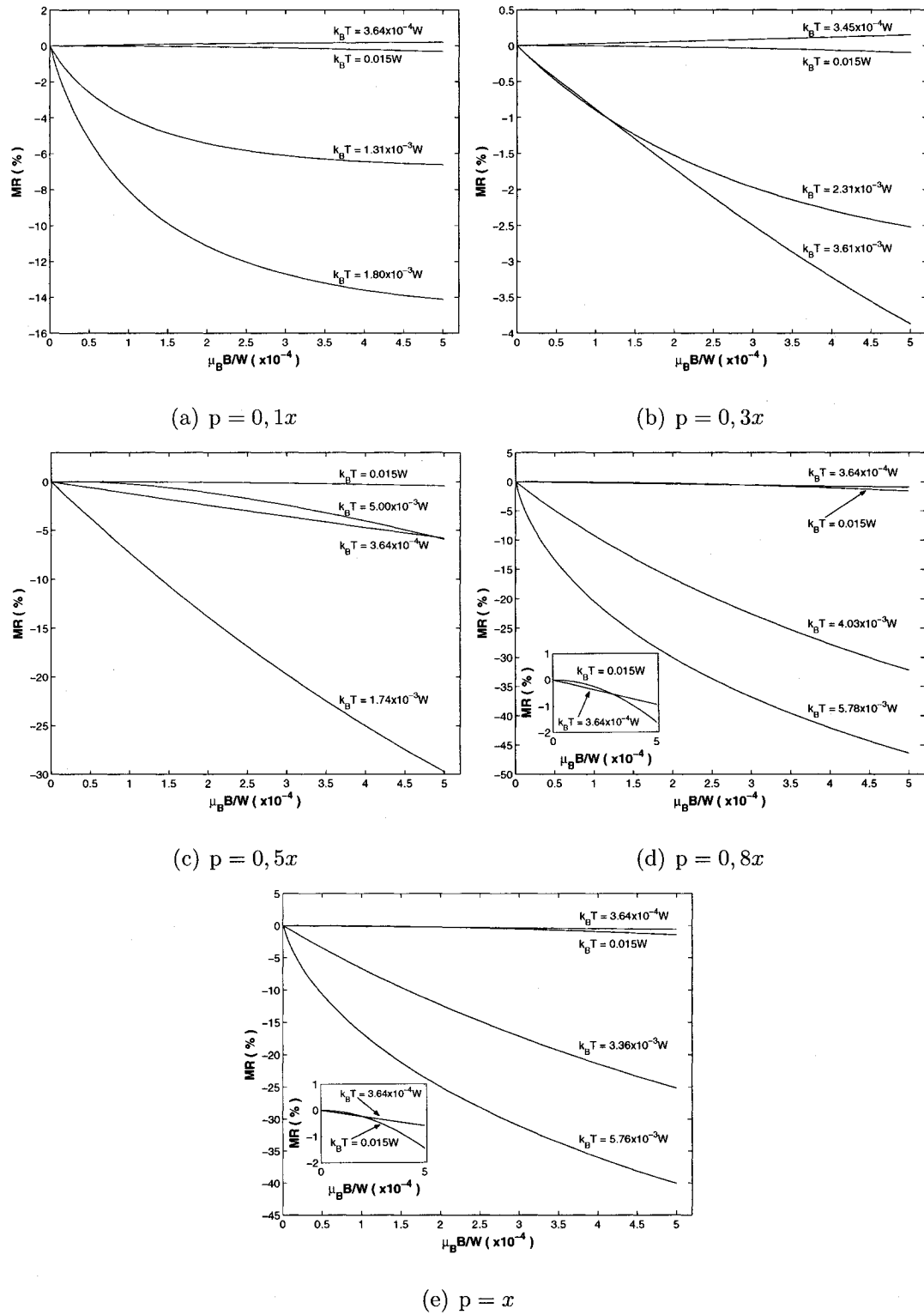


FIG. 5.20 Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,35W$

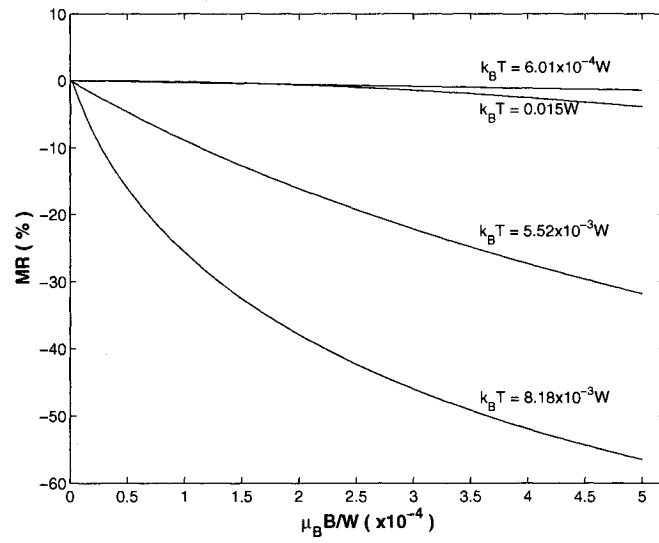
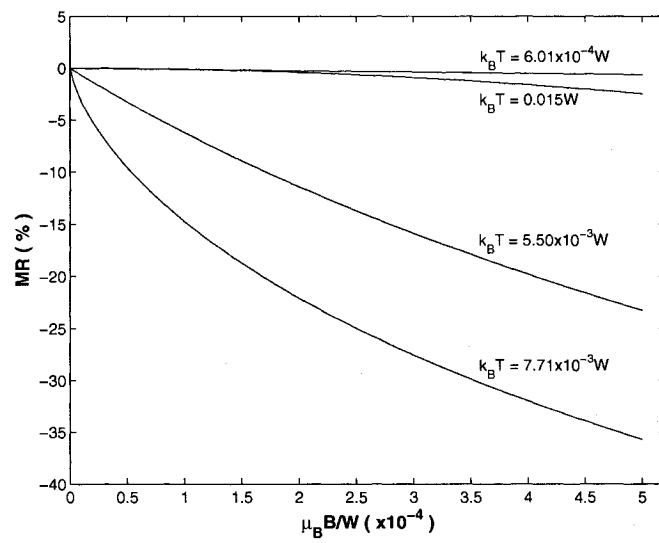
(a) $p = 0,8x$ (b) $p = x$

FIG. 5.21 Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,4W$

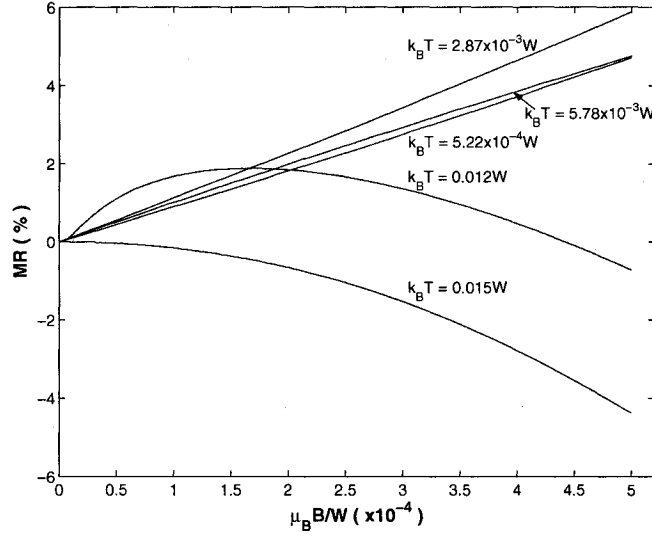


FIG. 5.22 Magnéto-résistivité pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $J_{pd} = 0,5W$

5.3.2.2 Résistivité de Hall

Pour une étude en fonction du champ, nous présentons ρ_H plutôt que R_H puisque $R_H = \frac{\text{Re}\{\sigma_{xy}(B_z)\}}{B_z[\text{Re}\{\sigma_{xx}(B_z)\}]^2}$ diverge quand B_z devient nul, alors que ce n'est pas le cas pour ρ_H . L'équation (17) montre comment peut s'exprimer le comportement de la résistivité de Hall en fonction de l'aimantation. Dans les expériences sur les DMS, le courant circule dans le plan de l'échantillon et le champ est appliqué perpendiculairement à la surface. Cette dernière direction, comme nous l'avons vu dans l'introduction, peut être un axe facile ou difficile d'aimantation, le M de l'équation (17) reflétant ce type d'axe. Ne considérant pas l'existence de domaines magnétiques et d'énergies d'anisotropie, notre modèle n'est pas à même de prédire des cycles d'hystérésis et des axes faciles et difficiles. Pour simuler les effets expérimentaux, nous allons considérer que l'aimantation des spins localisés suit la direction du champ et donc qu'il y a une marche à $B = 0$ pour M , car l'aimantation

est négative à $B = 0^-$ alors qu'elle est positive à $B = 0^+$. Une transition de type fonction échelon à $B = 0$ pour une température ni carrément paramagnétique ni très proche de T_c existera donc pour ρ_H . Ceci nous permet d'obtenir des résultats relativement comparables à l'expérience, considérant que le modèle donne une aimantation d'axe facile sans cycle d'hystérésis.

Les Figures 5.23, 5.24, 5.25 et 5.26 présentent la résistivité de Hall en fonction du champ appliqué lorsque $E_M = 0$ et $x = 0,053$, pour différentes valeurs de la constante d'échange, de la densité de porteurs et de la température. Comme nous en avons discuté au début de ce chapitre, nous ne voulons pas spécifier numériquement la demi-largeur de bande W pour le moment. Comme elle apparaît explicitement dans le facteur multiplicatif de l'équation (4.80) et qu'elle ne peut être intégrée comme facteur de normalisation, les résultats qui suivent sont la résistivité de Hall divisée par la demie largeur de bande, c'est-à-dire $\frac{\rho_H}{W}$, avec les unités $\left[\frac{\Omega m}{J}\right]$.

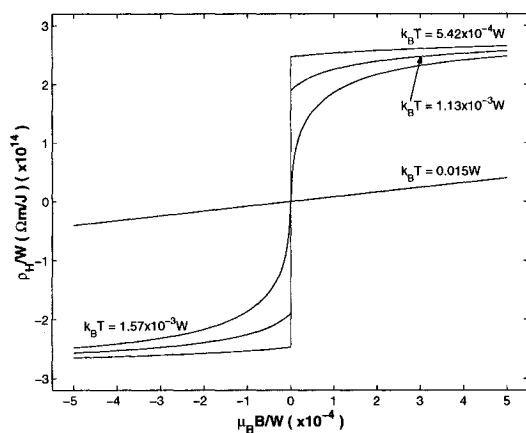
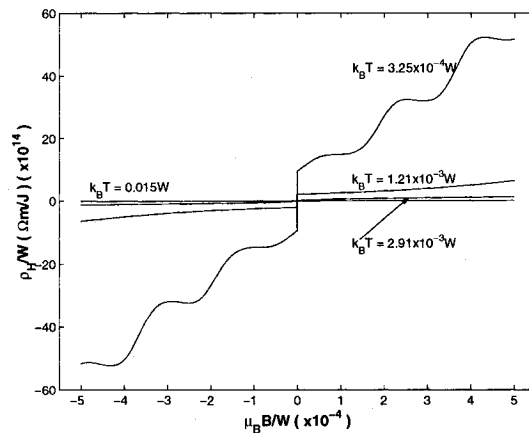
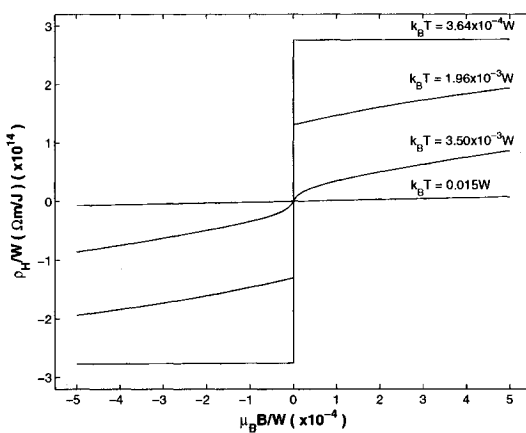
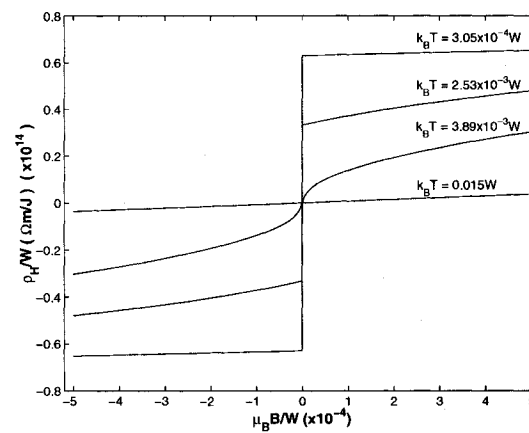
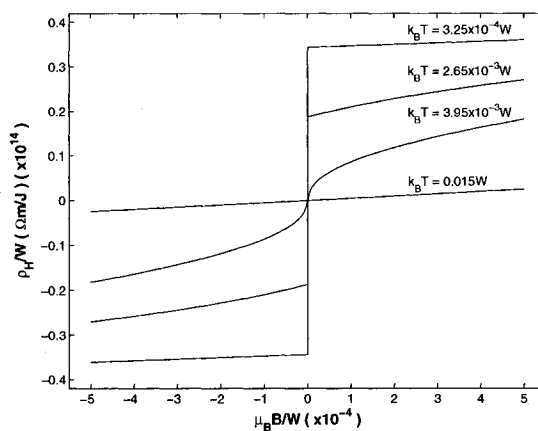
(a) $p = 0, 1x$ (b) $p = 0, 3x$ (c) $p = 0, 5x$ (d) $p = 0, 8x$ (e) $p = x$

FIG. 5.23 Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,3W$

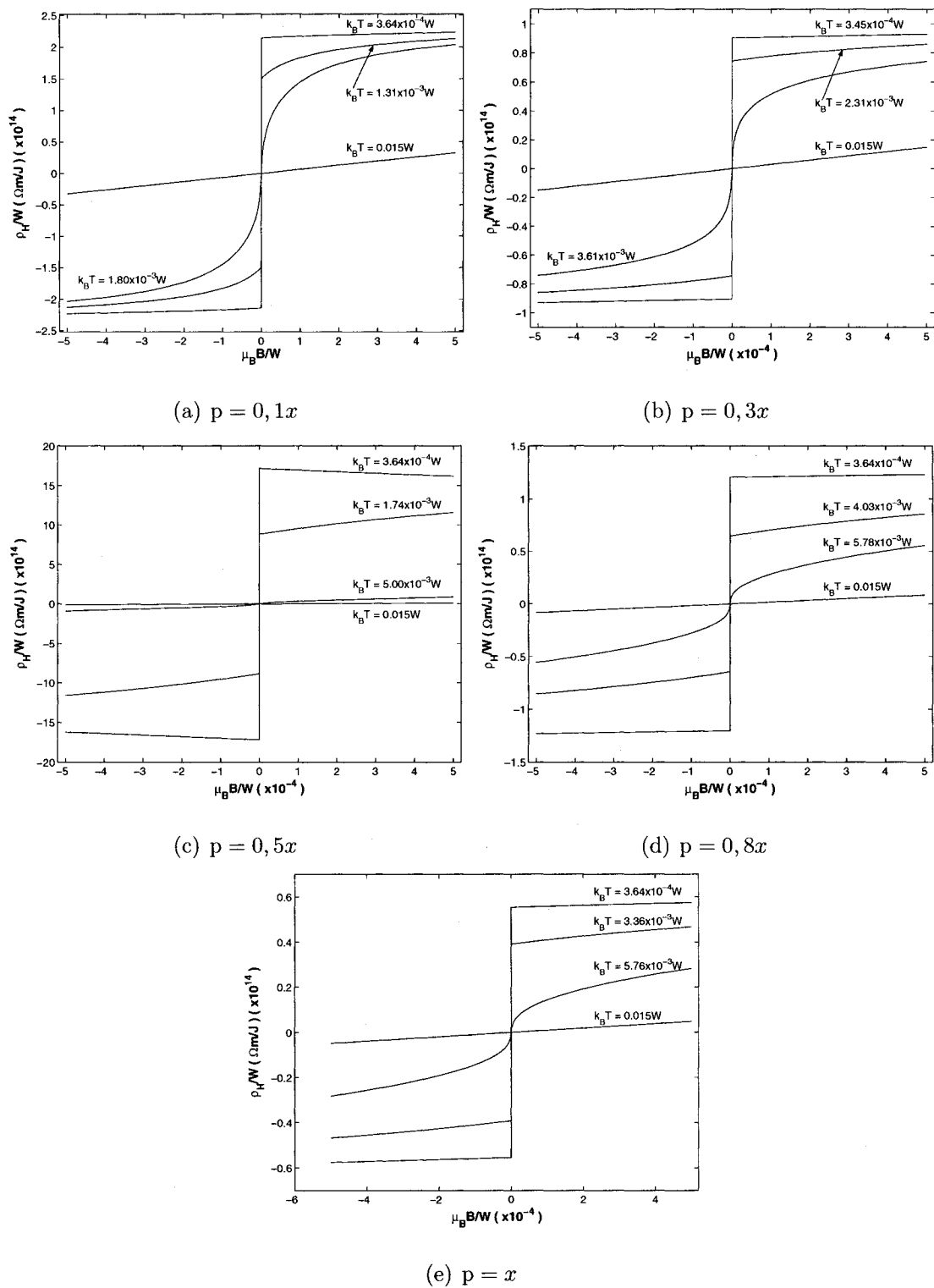


FIG. 5.24 Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,35W$

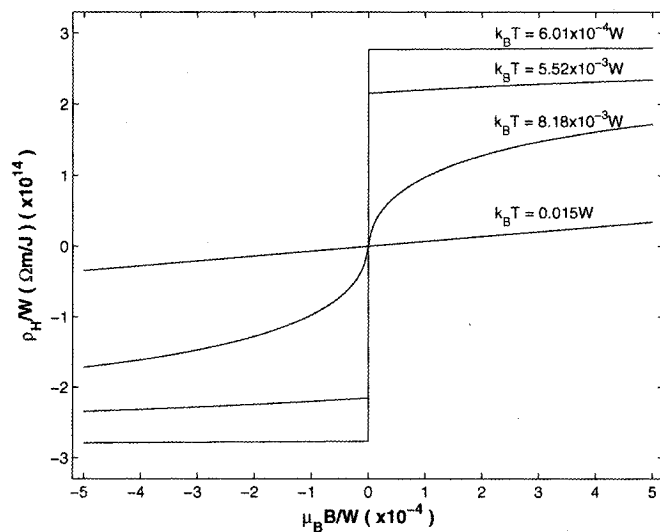
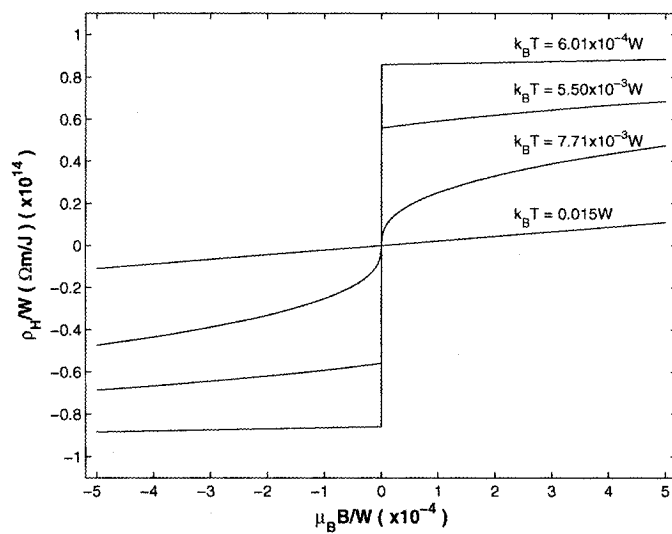
(a) $p = 0,8x$ (b) $p = x$

FIG. 5.25 Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$ et $J_{pd} = 0,4W$

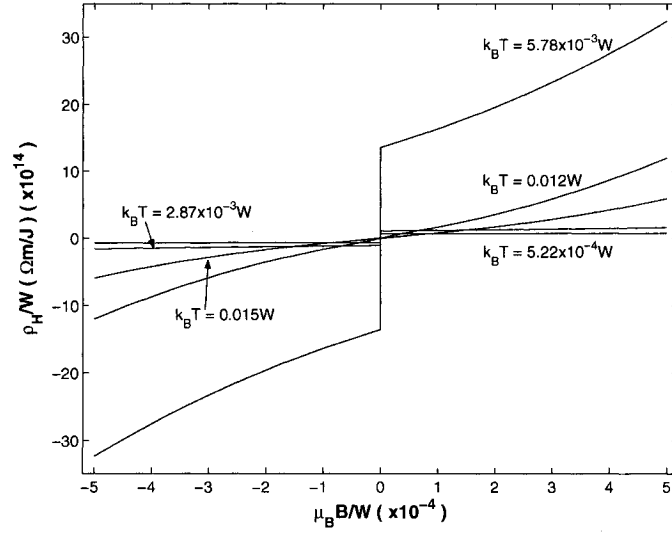


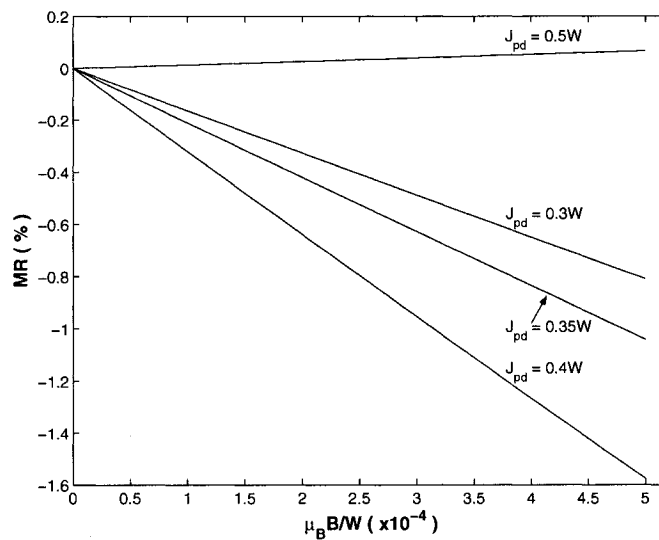
FIG. 5.26 Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique appliqué pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $J_{pd} = 0,4W$

Tous les résultats de $\rho_H(B)$ montrent clairement que le terme proportionnel à la polarisation des trous est dominant dans l'équation (4.80), puisque la forme des courbes est similaire à celle de $\langle s^z \rangle$, mais avec quelques modifications causées par $\Psi(T, B_z, p, x)$. Encore une fois, les couples $(J_{pd} = 0,3W, p = 0,3x)$ et $(J_{pd} = 0,5W, p = 0,8x)$ ont des comportements différents des autres et il faut ajouter, cette fois-ci, le couple $(J_{pd} = 0,35W, p = 0,5x)$ à $k_B T = 3,64 \times 10^{-4} W$. Comme mentionné, le couple $(J_{pd} = 0,3W, p = 0,3x)$ donne des résultats bizarres pour tous les coefficients de transport considérés. Nous ne sommes pas en mesure, en ce moment, d'expliquer pourquoi.

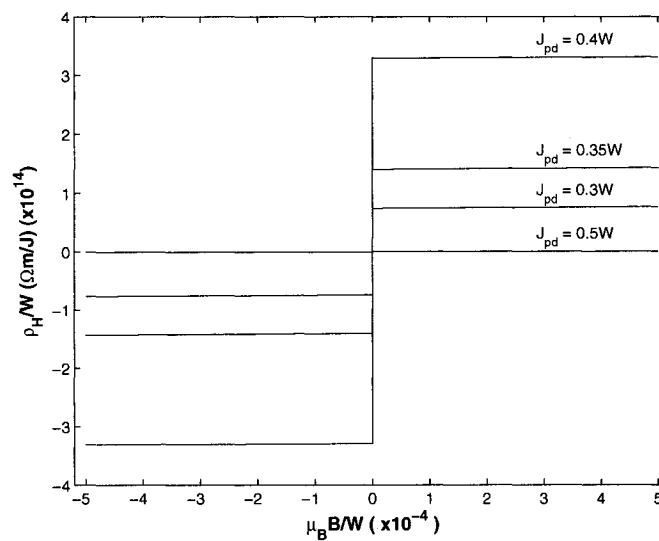
5.3.2.3 Magnéto-résistivité et résistivité de Hall à température nulle

Pour terminer cette section, nous présentons un résultat à température nulle. La Figure 5.27 nous montre la magnéto-résistivité et la résistivité de Hall pour une

fraction d'impuretés égale $x = 0,053$, pour $E_M = 0$ et pour différentes valeurs d'échanges J_{pd} . Les résultats sont comparables à ceux que nous avons obtenu précédemment pour des basses température.



(a)



(b)

FIG. 5.27 (a) Magnéto-résistivité et (b) résistivité de Hall ; pour une fraction d'impuretés égale à $x = 0,053$, $E_M = 0$, $p = 0,8x$ et $k_B T = 0$

Dans ce chapitre nous avons montré les prédictions du modèle pour les coefficients de transport les plus généralement mesurés expérimentalement. Les comportements sont variés et montrent, d'une part, la richesse du modèle, mais aussi la difficulté d'en retirer des réponses physiques simples, étant donné que le choix des paramètres a une très grande influence. Remarquons ici que, pour tous les résultats présentés, la valeur $E_M = 0$ a été utilisée, c'est-à-dire que l'effet des potentiels non-magnétiques sur les ions Mn ont été négligés, le temps imparti au projet ne nous ayant pas permis de faire varier cet autre paramètre. Bien sûr, l'effet de celui-ci, pouvant être important dans la réalité, mérite d'être étudié dans des travaux subséquents. Dans le chapitre suivant, à la lumière des prédictions du modèle, nous allons discuter de sa capacité à expliquer qualitativement les données expérimentales présentées au Chapitre 1.

CHAPITRE 6

DISCUSSION

Dans ce chapitre, nous comparons les prédictions présentées au chapitre précédent avec les données expérimentales correspondantes, discutées au Chapitre 1. Dans l'ordre, nous analysons la résistivité en fonction de la température, la magnétorésistivité et l'effet Hall. Comme nous l'avons déjà expliqué au Chapitre 5, les courbes pour la résistivité en fonction de la fraction d'impuretés et de la densité de porteurs ne peuvent pas vraiment être directement comparées avec l'expérience.

6.1 Résistivité en fonction de la température

L'approche par la CPA en étant une d'états étendus, il ne faut pas s'attendre à obtenir une concordance qualitative avec les mesures de transport provenant des échantillons isolants. D'après la Figure 1.1(a), pour des fractions de manganèse inférieures à 0,035 et supérieures à environ 0,07, il ne faut pas accorder trop d'importance aux résultats de notre modèle, puisque la conduction se fait probablement au travers d'états localisés. Les Figures 1.1, 1.2, 1.3 présentent, pour les systèmes métalliques, une variation de la résistivité entre $T = T_c$ (point de transition métal-isolant) et $T = 0$, pour les échantillons recuits, se situant entre 20 et 40% et une diminution plus ou moins faible de la résistivité avec la température pour $T > T_c$. Nous voulons donc savoir si la diffusion causée par le spin localisé des impuretés peut expliquer ce comportement même si Lopez-Sancho et Brey (Lopez-Sancho et Brey, 2003) et Hwang et Das Sarma (Hwang et Das Sarma, 2005) prétendent que la réponse est non.

D'après les Figures 5.5 à 5.8, le désordre de spin peut causer une transition métal-isolant autour de T_c , mais seulement lorsque la bande d'impuretés n'est pas complètement séparée de la bande de valence. Comme pour $x = 0,035$ et $x = 0,07$, le matériau réel est isolant, nous nous concentrons sur les prédictions de $x = 0,053$ pour fin de comparaison (voir Figure 5.7). La diminution de ρ au delà de T_c est faible, sauf pour ($J_{pd} = 0,4W, p = 0,8x$). Nos courbes de la Figure 5.7 avec $J_{pd} < 0,5W, p \geq 0,5x$ pour $J_{pd} \leq 0,35W$ et $p \geq 0,8x$ pour $J_{pd} = 0,4W$ ressemblent beaucoup aux données expérimentales. Toutefois, même si la différence $\rho(T = T_c) - \rho(T = 0)$ est du même ordre de grandeur, le pourcentage de différence $\frac{\rho(T=T_c) - \rho(T=0)}{\rho(T=T_c)} \times 100$ est de loin supérieur aux valeurs mesurées, qui se situent entre 20 à 40%. Pour diminuer ce pourcentage tout en gardant la même forme pour la courbe, il suffirait d'ajouter une constante additive à $\rho(T)$. La théorie concorderait alors bien avec l'expérience tant qualitativement que quantitativement.

La diffusion de charges par des impuretés statiques donne une contribution indépendante de la température ρ_0 à la résistivité. Si nous faisons l'approximation que la résistivité peut s'écrire comme la somme des contributions provenant des divers mécanismes de diffusion, $\rho_{vrai}(T) = \sum_i \rho_i(T)$, la courbe théorique devant être comparée avec la mesure expérimentale est $\rho_{Théo} = \rho_0 + \rho_{Désordre\ de\ spin}(T)$. En supposant que les collisions avec la charge des Mn et avec les autres défauts ionisés présents dans le matériau sont décrites par un terme constant en température, nos prédictions théoriques sont en accord avec l'expérience. Par exemple, pour $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$, si nous voulons un pourcentage de changement entre $T = T_c$ et $T = 0$ de 20% il faut que $\rho_0 \approx 10\ m\Omega cm$, tandis que nous devons utiliser $\rho_0 \approx 3,6\ m\Omega cm$ pour obtenir un pourcentage de 40%. Des valeurs quelques peu différentes sont obtenues pour d'autres p , mais une constante demeure, la valeur de ρ_0 est plus grande que celle du maximum obtenue pour ρ

avec le modèle, mais du même ordre de grandeur. Ceci signifie que la contribution constante provenant des impuretés statiques est plus importante que celle du désordre de spin, mais cette dernière n'est aucunement négligeable et donne la dépendance en température nécessaire. Il faut par contre mettre un bémol à propos de l'apparent accord entre la théorie et l'expérience. Premièrement, la densité de porteurs théoriquement considérée est nettement supérieure aux valeurs expérimentales de la littérature. Cependant, celles-ci provenant de l'extraction de R_0 dans la résistivité de Hall et nous avons déjà émis des réserves quant à ces valeurs dans le Chapitre 1. Deuxièmement, même si l'interaction de spin peut prédire une transition métal-isolant, il n'est pas certain que la constante d'échange (J_{pd}) nécessaire soit celle du système réel ou même que l'effet des autres bandes ne soit pas important, comme nous le supposons ici (nous n'avons utilisé qu'une seule bande). Rien ne nous permet de délaissier totalement la possibilité d'une densité de porteurs vraiment plus petite, qui résulte dans ce modèle en une diffusion par le spin totalement insuffisante, i.e. absence d'une transition métal-isolant. Nous pouvons seulement conclure que si la densité réelle de porteurs est relativement proche de la fraction de Mn active (qui donne un spin localisé 5/2), le modèle de ce mémoire est en bon accord avec l'expérience et montre que le désordre de spin peut-être un mécanisme nécessaire pour la résistivité.

6.2 Magnéto-résistivité

Pour un champ magnétique externe non nul, la Figure 5.18(b) montre que la résistivité en fonction de la température a un comportement tout à fait semblable à celui de l'expérience (Figure 1.3). À très basse température, comme nous l'avons vu au Chapitre 1, la magnéto-résistivité montre une petite partie positive lorsque le champ est faible. Bien sûr, nous ne pouvons reproduire ce comportement avec notre

modèle, celui-ci ne considérant pas les domaines magnétiques. Nous remarquons, en plus, que pour toutes les températures étudiées inférieures à T_c , l'expérience donne une courbe concave lorsque MR est négatif. Encore une fois, nos courbes avec p trop petit sont en désaccord avec l'expérience, étant donné qu'une MR positive pour tout B n'est jamais obtenue expérimentalement. Pour p plus élevé, à très basse température et lorsqu'il n'y a pas de bande d'impuretés bien séparée, nous obtenons une courbe certes négative, mais convexe. À température plus élevée mais inférieure à $T = T_c$, en conservant les mêmes paramètres intrinsèques, nous obtenons bien (comme à la Figure 1.5) une courbe concave et une valeur de MR augmentant de façon plus importante en fonction de B avec l'augmentation de T . Quand T est très au-dessus de T_c ($k_B T = 0,015W$), le changement de MR avec B est peu important par rapport à ceux se produisant pour des températures ni trop basses, ni au-dessus de T_c . Ceci correspond avec la Figure 1.4, bien que nous ne pouvons voir si la courbe à $300K$ est constante ou présente une petite variation concave ou convexe. Ces résultats semblent montrer qu'avec p au-dessus de $0,5x$ et avec la bande d'impuretés qui s'hybride avec celle de valence, le modèle est relativement bon, sauf à très basse température où il échoue à prédire une forme concave à la courbe.

6.3 Résistivité de Hall en fonction du champ magnétique

Expérimentalement parlant, l'amplitude de la résistivité de Hall est de loin plus élevée quand l'axe facile est selon la direction perpendiculaire au plan (la direction de champ). Sur la Figure 1.7(a), pour 2 K et pour l'axe facile dans le plan, la valeur maximale de ρ_H est $\rho_H = R_{Hall} * d \approx 0,6 \text{ m}\Omega\text{cm}$. Les données de la fenêtre du haut de la Figure 1.7(b) proviennent aussi d'échantillons avec l'axe facile dans le plan et la valeur maximale de ρ_H à 2 K est $\rho_H = R_{Hall} * d \approx 0,7 \text{ m}\Omega\text{cm}$. Par contre, lorsque

l'axe facile est selon la direction du champ (comme pour la fenêtre du bas de la Figure 1.7(b)), la valeur maximale de la résistivité de Hall est $\rho_H = R_{Hall} * d \approx 2,6$ m Ω cm ce qui est environ quatre fois supérieur au premier cas. Comme nos calculs n'incluent pas d'axe difficile, nos résultats devraient, au niveau quantitatif, être plutôt comparés avec ceux concernant le champ appliqué selon l'axe facile d'aimantation (perpendiculaire au plan). Il ne faut toutefois pas oublier que, contrairement aux courbes à basse température de la fenêtre du bas de la Figure 1.7(b), nous n'avons pas d'hystérésis dans ρ_H , les domaines magnétiques n'ayant pas été considérés. Pour plusieurs densités de porteurs différentes, nos courbes présentent un comportement semblable à la fenêtre du bas de la Figure 1.7(b), nonobstant l'hystérésis. Lorsque $p = 0,1x$ et $p = 0,3x$, les prédictions de la résistivité longitudinale sont en désaccord avec l'expérience (voir Section 5.2.1) et nous ne comparerons pas ces données pour ρ_H . Regardons les résultats pour $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$ puisque ces deux paramètres donnent de bons résultats pour les coefficients du transport déjà discutés. Encore une fois, le comportement est qualitativement excellent à basse et à haute température. Au niveau quantitatif, le maximum obtenu pour la résistivité de Hall, en utilisant la demie largeur de bande de l'équation (5.3) est $\rho_H \approx 6,7$ m Ω cm pour une température qui vaut, avec ce W , $T = 14,4$ K, alors que nous obtenons $\rho_H \approx 7,9$ m Ω cm pour $T = 0$. Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que ceux de l'expérience. Excluant l'hystérésis à basse température, les calculs incluant l'interaction spin-orbite intrinsèque traitée comme (Movaghar et Cochrane (a), 1991) et la diffusion par les spins localisés donne des résultats se comparant très bien avec l'expérience pour le $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$.

6.4 Coefficient de Hall en fonction de la température

Nous finissons cette discussion en abordant la variation du coefficient de Hall en fonction de la température. Pour ces calculs, le champ a été appliqué à haute température, puis cette dernière a été diminuée jusqu'à sa valeur minimale. Nos figures (Figures 5.15, 5.16 et 5.17) pour des paramètres constants, présentent des variations de formes et d'amplitudes pour des champs magnétiques appliqués différents, contrairement à la Figure 1.6, qui montre deux exemples du coefficient de Hall en fonction de la température sans aucune dépendance en champ. Cependant, ce comportement n'est réel que si, à partir d'une certaine température, l'aimantation devient proportionnelle au champ magnétique appliqué $M = \chi(T)H$ et si les coefficients R_0 et R_S sont indépendants du champ. Ainsi, l'équation (17) s'écrirait

$$\rho_H(T) = R_0(T)B_z^0 + \frac{R_S(T)\chi}{\mu_0}B_z^0, \quad (6.1)$$

ce qui donne, pour le coefficient de Hall,

$$R_H(T) = \frac{\rho_H}{B_z^0} = R_0(T) + \frac{R_S(T)\chi}{\mu_0}, \quad (6.2)$$

une quantité indépendante du champ magnétique appliqué. En utilisant la susceptibilité donnée par la loi de Curie-Weiss, Matsukura *et al.* (Matsukura *et al.*, 2002) et Ruzmetov *et al.* (Ruzmetov *et al.*, 2004) reproduisent bien leurs courbes expérimentales à $T > T_c$. Par contre, Ruzmetov *et al.* (Ruzmetov *et al.*, 2004) (Figure 1.6(a)) tentent aussi de définir un coefficient de Hall en fonction de la température ne dépendant pas du champ appliqué pour $T < T_c$. Pour ce faire, ils prennent les résultats de la résistivité de Hall (voir par exemple la Figure 3 de (Ruzmetov *et al.*, 2004) pour $T = 4K$), essaient de trouver une région où ρ_H est linéaire avec le champ et en tire un R_H en trouvant la pente. Pour toutes les températures

inférieures à T_c , ils utilisent les données entre -500 Oe et 500 Oe et supposent que le coefficient ainsi obtenu est celui devant être utilisé pour la courbe en fonction de la température. La signification physique de cette procédure est impénétrable, ce choix étant complètement arbitraire, et ne représente rien selon nous. Ceci n'a pas d'incidence sur les résultats principaux de l'article, étant donné qu'ils utilisent ultimement les mesures à haute température, mais lorsque nous cherchons à comparer nos prédictions avec les leurs, nous ne pouvons pas vraiment tenir compte des basses températures. Nous pourrions essayer de procéder comme eux. Comme les champs que nous avons utilisés sont bien plus élevés que 500 Oe (avec $W = 3,42\text{eV}$, $\mu_B B/W = 1 \times 10^{-5}$ équivaut à $0,6$ T ce qui correspond à environ 6000 Oe), la région considérée comporte une pente bien différente de celle qu'ils utilisent, en se référant à leur Figure 3 ((Ruzmetov *et al.*, 2004)), où le champ est limité à $\pm 0,2$ T. Tout en gardant en tête que supposer une variation linéaire en champ magnétique pour R_H lorsque $T < T_c$ n'a au mieux qu'un sens physique flou, nous pouvons quand même essayer une procédure analogue à la leur, en traçant $\rho_H(T)B_z$ pour les trois champs utilisés ($\mu_B B/W = 1 \times 10^{-5}$, 1×10^{-4} et 3×10^{-4}) et en effectuant une régression linéaire sur chaque trio de points pour une température donnée. Le coefficient R_H correspond à la pente de chaque droite. La Figure 6.1 montre ce calcul pour $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$ ainsi que les courbes pour trois champs magnétiques différents.

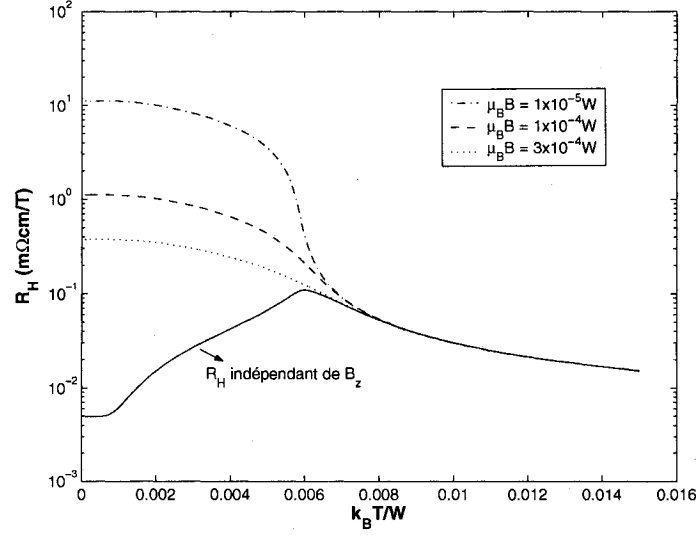


FIG. 6.1 Coefficient de Hall en fonction de la température pour les paramètres $x = 0,053$, $J_{pd} = 0,35W$, $E_M = 0$ et $p = 0,8x$.

Nous remarquons qu'à partir d'une certaine température d'environ $k_B T/W = 0,008$, les quatre courbes sont superposées, $R_H(T)$ devenant indépendant du champ magnétique (c'est le cas pour toutes nos courbes pas seulement celles-ci) et se comportant de manière similaire aux résultats de Matsukura *et al.* (Matsukura *et al.*, 2002) et Ruzmetov *et al.* (Ruzmetov *et al.*, 2004). Pour $k_B T/W < 0,008$, nous avons une montée suivie d'une descente de R_H quand $T \rightarrow 0$ pour la courbe indépendante de B_z , comme Ruzmetov *et al.* (Ruzmetov *et al.*, 2004), mais avec un changement bien plus important. Là s'arrêtent les comparaisons puisque, ne croyant pas que cette façon de faire soit justifiée, nous préférons affirmer que R_H change en fonction du champ constant appliqué pour $k_B T/W < 0,008$, mais malheureusement, aucune mesure expérimentale n'est disponible pour valider ce résultat.

6.5 Récapitulatif

Si nous regardons l'ensemble des coefficients de transport que nous avons calculé et discutés dans ce chapitre, nous remarquons bien que pour certains couples d'échange et de densité de porteurs, comme par exemple $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$, les résultats sont qualitativement en relativement bon accord avec l'expérience pour tous les coefficients, rendant nos prédictions très intéressantes. La Figure 6.2 présente ces résultats du Chapitre 5 pour $J_{pd} = 0,35W$ et $p = 0,8x$ ($R_H(T)$ n'étant comparable qu'à haute température, nous ne l'incluons pas dans la figure). Cette fois-ci, la contribution constante des impuretés statiques à la résistivité (ρ_0) est incluse.

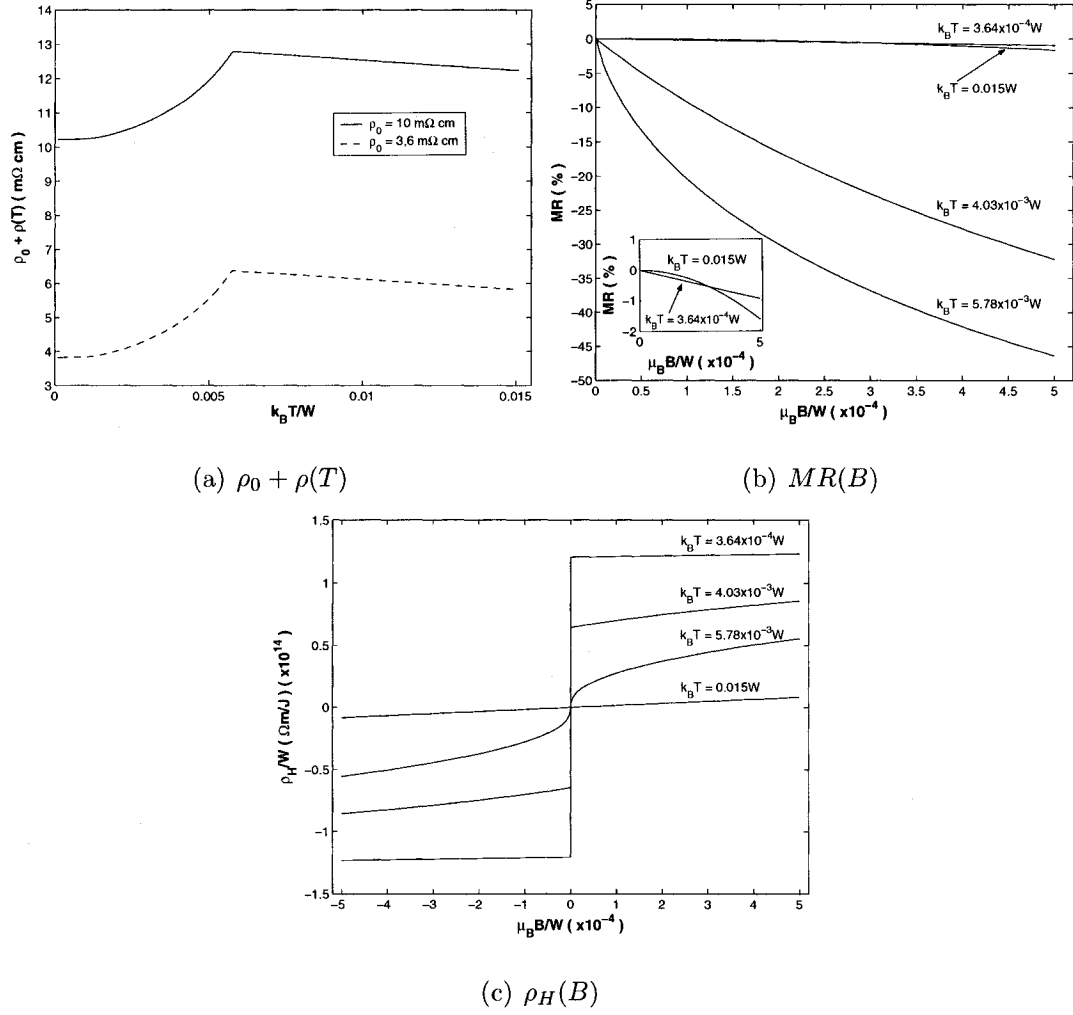


FIG. 6.2 Coefficients du transport se comparant directement avec l'expérience pour $E_M = 0$, $J_{pd} = 0,35 \text{ W}$ et $p = 0,8x$.

Notons qu'avec $W = 3,42 \text{ eV}$, $J_{pd} = 0,35 \text{ W}$ à une valeur numérique de $1,197 \text{ eV}$ ce qui, même avec un modèle à une seule bande, est en bon accord avec le résultat de Okabayashi *et al.* (Okabayashi *et al.*, 1998), obtenu par photo-émission, $J_{pd} = 1,1 \pm 0,2 \text{ eV}$. Avec la même demie largeur de bande, en prenant le point où la transition métal-isolant se produit dans $\rho(T, B = 0)$ ($k_B T/W \approx 0.0058$), la température de Curie est $T_c = 230,2 \text{ K}$. Celle-ci est plus du double de la valeur de 110 K obte-

nue par Ohno et ses collaborateurs (Ohno, 1999). Par contre, rappelons-nous que $W = 3,42\text{eV}$ n'est pas une valeur fixe et que le coupe ($J_{pd} = 0,35W$, $p = 0,8x$) n'est pas nécessairement le couple exacte qui reproduit l'expérience, mais bien un exemple du genre de paramètres qu'il faut pour obtenir un bon accord. Bien que nous ne pouvons affirmer avec certitude que notre modèle explique bien les processus microscopiques responsables des propriétés de transports observées dans le $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, nous avons à tout le moins montré qu'exclure cette approche n'est pas encore justifié. Évidemment, s'il est prouvé hors de tous doute que la densité de porteurs réelle est de loin inférieure à x , il faudra conclure à l'insuffisance de notre modèle et chercher quels autres mécanismes sont responsables des propriétés de transport. Un processus créant un pseudo-gap plus près du bord de bande, réduisant ainsi la densité de porteurs nécessaire pour que l'énergie de Fermi se retrouve autour de cette région, permettrait d'obtenir des résultats qualitativement corrects pour p plus petit. Même si, pour tous nos résultats, nous avons supposé $E_M = 0$, une valeur non-nulle n'est pas suffisante pour réduire la densité de porteurs nécessaire. En effet, bien qu'une valeur négative de E_M signifie une interaction plus forte entre les trous et les ions localisés, la pseudo-bande interdite n'est pas plus près du bord de bande, mais apparaît seulement pour un J_{pd} plus faible. Bien que la variation des coefficients du transport en fonction de E_M constitue une étude d'intérêt, l'accord avec l'expérience pour les valeurs de p plus faibles n'en serait pas améliorée. Il ne faudrait pas non plus négliger la possibilité qu'une partie des états accessibles aux porteurs soient localisés. La contribution de tous les états au calcul de la conductivité serait modifiée, dû à l'existence de deux types d'états.

Il serait des plus intéressant de vérifier s'il est possible d'intégrer un champ magnétique selon un autre axe que z , en particulier selon x , la direction du courant. Dans ce cas, pouvons-nous obtenir des expressions mathématiques utilisables pour t_{ss} (équations (4.95) et (4.97)) considérant qu'un champ dans une direction autre

que z se retrouve inclus dans les termes non-diagonaux de v_m (équations (4.91) et (4.92)) ? De plus, l'équation (II.24) peut-elle être résolue si $B^0 = B_x^0 \hat{x}$? Si c'est possible, la comparaison entre les deux directions de champ serait d'une très grande valeur. Le modèle lui-même pourrait encore être amélioré. En premier lieu, nous devrions utiliser la façon exacte d'effectuer la moyenne thermique (équation (4.111)) au lieu d'un champ moyen de spin pour vérifier si des différences significatives apparaissent. Nous croyons que ce sera mineure, mais il serait judicieux de le vérifier.

CONCLUSION

L'objectif de ce travail était de développer un modèle microscopique permettant d'étudier les propriétés de transport dans les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), formés d'un cristal hôte III-V dopé en grande quantité par des atomes de manganèse, plus particulièrement $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$. Dans ce modèle, les spins des trous p , générés par l'incorporation du Mn, interagissent avec les moments magnétiques localisés provenant des cinq électrons d de ce même atome par une interaction d'échange antiferromagnétique. L'effet spin-orbite intrinsèque des trous lourds a lui aussi été considéré et nous avons utilisé l'approximation du potentiel cohérent (CPA) pour traiter le désordre. Plus particulièrement, l'approche de (Takahashi et Mitsui, 1996) a été adoptée. Les conductivités longitudinale et de Hall ont été calculées en utilisant les formules de Kubo, une approche totalement quantique. L'effet spin-orbite intrinsèque a été intégré aux formules pour l'effet Hall en suivant le travail de Movaghar et Cochrane (Movaghar et Cochrane (a), 1991). Notre approche entre donc dans la catégorie adoptée par Jungwirth *et al.* (Jungwirth *et al.*, 2002; Jungwirth *et al.*, 2003), mais contrairement à eux, nous avons calculé l'effet de la température et du champ magnétique sur le coefficient et la résistivité de Hall.

Notre objectif a été atteint, puisque le modèle a été en mesure, considérant certains paramètres précis, de reproduire qualitativement les comportements observés expérimentalement pour $\rho(T)$, MR , $R_H(T)$ et $\rho_H(B)$. Pour la résistivité en fonction de la température, nous avons montré qu'en ajoutant une contribution due aux impuretés statiques, la diffusion par les spins pouvait être un mécanisme suffisant, contrairement aux croyances de plusieurs (Lopez-Sancho et Brey, 2003; Hwang et Das Sarma, 2005; Kagami *et al.*, 2005). La conclusion principale de ce mémoire

qu'il est probablement encore trop tôt pour rejeter la diffusion par le désordre de spin comme l'un des mécanismes dominant dans le transport. Des mesures fiables de la densité de porteurs pourraient cependant signer le glas de cette diffusion dans le cas où il s'avèrerait que $p \ll x$.

Notre méthode est complète et calcule toute la densité d'états, ne se limitant pas seulement aux énergies proches du niveau de Fermi, ce qui permet d'intégrer tous les états dans le calcul de la conductivité. Malheureusement, seuls les états étendus sont considérés, alors que la présence d'états localisés pourrait être importante. Notre approche pourrait encore être améliorée et ainsi permettre des conclusions toujours plus solides sur les systèmes décrits par l'Hamiltonien (4.1).

À long terme, il faudra peut-être envisager une description plus détaillée du matériau hôte et trouver une manière d'intégrer la diffusion par interaction de Coulomb. Certains choix devront également être faits, se situant entre procéder par une approche avec des modèles simples, où la physique est claire et/ou adopter une approche tout numérique du problème.

RÉFÉRENCES

- Allen, W., E. G. Gwinn, T. C. Kreutz et A. C. Gossard, 2004, Anomalous Hall effect in ferromagnetic semiconductors with hopping transport, *Phys. Rev. B* **70**, 125320
- Auslender, Mark et Eugene Kogan, 2001, CPA density of states and conductivity in a double-exchange system containing impurities, *Eur. Phys. J. B* **19**, 525
- Berger, L., 1970, Side-Jump Mechanism for the Hall Effect of Ferromagnets, *Phys. Rev. B* **2**, 4559
- Berger, L. et G. Bergmann, 1979, C.L. Chien et C.R. Westgate (Ed.), The Hall effect and its applications, Plenum press, New York, London, p.55
- Böttger, H. et V. V. Bryksin, 1985, Hopping conduction in solids, Verlag, Berlin
- Bouzerar, G., J. Kudrnovsky et P. Bruno, 2003, Disorder effects in diluted ferromagnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **68**, 205311
- Burkov, A. A. et Leon Balents, 2003, Anomalous Hall effect in ferromagnetic semiconductors in the hopping transport regime, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 057202
- Calderon, M. J., G. Gomez-Santos et L. Brey, 2002, Impurity-semiconductor band hybridization effects on the critical temperature of diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **66**, 075218
- Campbell, I. A. et A. Fert , 1982, E.P. Wohlfarth (Ed.), Ferromagnetic materials, Vol.3, North-Holland, New York, p.747
- Chazalviel, J.-N., 1975, Spin-dependent Hall effect in semiconductors, *Phys. Rev. B* **11**, 3918
- Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu et Franck Laloë , 1998, Mécanique quantique I, Hermann Paris

- Cottam, M.G. et R. B. Stikchcombes, 1968, The theory of the ordinary Hall coefficient of iron at low temperatures, *J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.)* **1** ser. 2, 1052
- Crépieux, A., P. Bruno, 2001, Theory of the anomalous Hall effect from the Kubo formula and the Dirac equation, *Phys. Rev. B* **64**, 014416
- Dietl, T., H. Ohno et F. Matsukura, 2001, Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors, *Phys. Rev. B* **63**, 195205
- Dietl, Tomasz, Fumihiro Matsukura, Hideo Ohno, Joël Cibert et David Ferrand, 2003, Hall effect and magnetoresistance in p-type ferromagnetic semiconductors, cond-mat/0306484
- Economu, E. N., 1983, Green's functions in quantum physics, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo
- Edmonds, K. W., K. Y. Wang, R. P. Campion, A. C. Neumann, N. R. S. Farley, B. L. Gallagher et C. T. Foxon, 2002, High-Curie-temperature $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ obtained by resistance-monitored annealing, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 4991
- Edwards, D. M., A. M. C. Green et K. Kubo, 1999, Electronic structure and resistivity of the double exchange model, *J. Phys. Condens. Matter.* **11**, 2791
- Elliot, Stephen, 2000, The physics and chemistry of solids, John Wiley & sons Chichester
- Ferrand, D., J. Cibert, A. Wasiela, C. Bourgognon, S. Tatarenko, G. Fishman, T. Andrearczyk, J. Jaroszynski, S. Kolesnik, T. Dietl, B. Barbara et D. Dufeu, 2001, Carrier-induced ferromagnetism in $p\text{-Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, *Phys. Rev. B* **63**, 085201
- Fisher, Michael E. et J.S. Langer, 1968, Resistive anomalies at magnetic critical points, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 665
- Friedman, L., 1985, D. Adler, H. Fritzche et S.R. Ovshinsky (Ed.), Physics of disordered materials, Plenum press, New York, London, p.413

- Georges, Antoine, Gabriel Kotliar, Werner Krauth et Marcelo J. Rozenberg, 1996, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13
- Hurd, C. M., 1972, The Hall effect in metals and alloys, Plenum press, New York, London
- Hwang, E. H. et S. Das Sarma, 2005, Transport properties of diluted magnetic semiconductors : Dynamical mean field theory and Boltzmann theory, cond-mat/0503077
- Ivanov, V. A., P. M. Krstajic, F.M. Peeters, V. Fleurov et K. Kikoin, 2003, On the nature of ferromagnetism in ddilute magnetic semiconductors : GaAs :Mn and GaP :Mn, *J. Magn. Magn. Mater.* **258-259**, 237
- Jones, William et Norman H. March (a), 1973, Theoretical solid state physics volume 1 : Perfect lattices in equilibrium, John Wiley & Sons London, New York, Sydney, Toronto
- Jones, William et Norman H. March (b), 1973, Theoretical solid state physics volume 2 : Non-equilibrium and disorder, John Wiley & Sons London, New York, Sydney, Toronto
- Jungwirth, T., Qian Niu et A.H. MacDonald, 2002, Anomalous Hall effect in ferromagnetic semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 207208
- Jungwirth, T., J. Sinova, K. Y. Wang, K. W. Edmonds, R. P. Campion, B. L. Gallagher, C. T. Foxon, Qian Niu et A.H. MacDonald, 2003, Dc-transport properties of ferromagnetic (Ga,Mn)As semiconductors, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 320
- Kagami, K., M. Takahashi et K. Kubo, 2005, Transport and Optical Properties of Diluted Magnetic Semiconductors, *J. Supercond.* **18**, 121
- Kaminski, A. et S. Das Sarma, 2003, Magnetic and transport percolation in diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **68**, 235210

- Kohn, W. et J. M. Luttinger, 1957, Quantum theory of electrical transport phenomena, *Phys. Rev.* **108**, 590
- Kubo, R., 1956, A general expression for the conductivity tensor, *Can. J. Phys.* **34**, 1274
- Kubo, R., 1957, Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570
- Liu, X., Y. Sasaki et J. K. Furdyna, 2003, Ferromagnetic resonance in $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$: Effects of magnetic anisotropy, *Phys. Rev. B* **67**, 205204
- Lopez-Sancho, M. P. et L. Brey, 2003, Temperature dependence of dielectric constant and resistivity of diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **68**, 113201
- Luttinger, J. M., 1956, Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors : General theory, *Phys. Rev.* **102**, 1030
- Majlis, Norberto, 2001, The quantum theory of magnetism, World Scientific Singapore
- Malwah, M. L. et R. W. Bene, 1972, Hall effect in the Hubbard model : Low-field regime, *Phys. Rev. B* **6**, 3305
- Matsubara, Takeo et Takahito Kaneyoshi, 1968, Contribution to the theory of impurity band conduction. II, *Progr. Theor. Phys.* **40**, 1257
- Matsukura, F., H. Ohno, A. Shen et Y. Sugawara , 1998, Transport properties and origin of ferromagnetism in $(\text{Ga,Mn})\text{As}$, *Phys. Rev. B* **57**, R2037
- Matsukura, F., H. Ohno et T. Dietl , 2002, K.H.J. Buschow (Ed.), Handbook of magnetic Materials, Vol.14, Elsevier, Amsterdam, p.1.
- Matsukura, F., M. Sawicki, T. Dietl, D. Chiba et H. Ohno, 2004, Magnetotransport properties of metallic $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ films with compressive and tensile strain, *Physica E* **21**, 1032

- McGuire, T. R., R. J. Gambino et R. C. O'Handley , 1979, C.L. Chien et C.R. Westgate (Ed.), The Hall effect and its applications, Plenum press, New York, London, p.137
- Movaghar, B. et R.W. Cochrane, 1991 (a), The Hall effect in amorphous metals and alloys, *Phys. Stat. Sol. (b)* **166**, 311
- Movaghar, B. et R.W. Cochrane, 1991 (b), The connection between Hall effect and magnetism, *Z. Phys. B* **85**, 217
- Munekata, H., H. Ohno, S. von Molnar, A. Segmüller, L. L. Chang et L. Esaki, 1989, Diluted Magnetic III-V Semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 777
- Nam, S.B., D. C. Reynolds, C. W. Litton, R. J. Almassy et T. C. Collins, 1976, Free-exciton energy spectrum in GaAs, *Phys. Rev. B* **13**, 761
- Nazmul, Ahsan M., S. Sugahara et M. Tanaka, 2003, Ferromagnetism and high Curie temperature in semiconductor heterostructures with Mn δ -doped GaAs and p-type selective doping, *Phys. Rev. B* **67**, 241308(R)
- Ohno, H., H. Munekata, S. von Molnar et L. L. Chang , 1991, New III-V diluted magnetic semiconductors (invited), *J. App. Phys.* **69**, 6103
- Ohno, H., H. Munekata, T. Penney, S. von Molnar et L. L. Chang , 1992, Magneto-transport properties of p-type (In,Mn)As diluted magnetic III-V semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2664
- Ohno, H., A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumato et Y. Iye , 1996, (Ga,Mn)As : A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs, *App. Phys. Lett.* **69**, 363
- Ohno, H., 1999, Properties of ferromagnetic III-V semiconductors, *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 110
- Okabayashi, J., A. Kimura, O. Rader, T. Mizokawa, A. Fujimori, T. Hayashi and et M. Tanaka, 1998, Core-level photoemission study of $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, *Phys. Rev. B* **58**, R4211

- Omiya, T., F. Matsukura, T. Dietl, Y. Ohno, T. Sakon, M. Motokawa et H. Ohno , 2000, Magnetotransport properties of (Ga,Mn)As investigated at low temperature and high magnetic field, *Physica E* **7**, 976
- Pearton, S. J., M. E. Overberg, G. T. Thaler, C. R. Abernathy, J. Kim, F. Ren, N. Theodoropoulou, A. F. Hebard et Yun Daniel Park , 2003, Room temperature ferromagnetism in GaMnN and GaMnP, *Phys. Stat. Sol. (a)* **195**, 222
- Potashnik, S. J., K. C. ku, S. H. Chun, J. J. Berry, N. Samarth et P. Schiffer , 2001, Effects of annealing time on defect-controlled ferromagnetism in $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, *App. Phys. Lett.* **79**, 1495
- Potashnik, S. J., K. C. ku, R. Mahendiran, S. H. Chun, R. F. wang, N. Samarth et P. Schiffer , 2002, Saturated ferromagnetism and magnetization deficit in optimally annealed $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ epilayers, *Phys. Rev. B* **66**, 012408
- Pugh, Emerson M., 1930, Hall Effect and the Magnetic Properties of Some Ferromagnetic Materials, *Phys. Rev.* **36**, 1503
- Pugh, E. M. et T. W. Lippert , 1932, Hall e.m.f. and Intensity of Magnetization, *Phys. Rev.* **42**, 709
- Reine, M., R. L. Aggarwal, B. Lax et C. M. Wolfe, 1970, Split-Off Valence-Band Parameters for GaAs from Stress-Modulated Magnetorefectivity, *Phys. Rev. B* **2**, 458
- Ruzmetov, D., J. Scherschligt, David V. Baxter, T. Wojtowicz, X. Liu, Y. Sasaki, J. K. Furdyna, K. M. Yu et W. Walukiewicz , 2004, High-temperature Hall effect in $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, *Phys. Rev. B* **69**, 155207
- Sawicki, M., F. Matsukura, A. Idziaszek, G. M. Schott, G. Karczewski, C. Ruester, G. Schmidt, L. W. Molenkamp et T. Dietl, 2002, Temperature Dependent Magnetic Anisotropy in (Ga,Ma)As Layers, cond-mat/0212511
- Schairer, W. et M. Schmidt, 1974, Strongly quenched deformation potentials of the Mn acceptor in GaAs, *Phys. Rev. B* **10**, 2501

- Seong, M. J., S. H. Chun, H. M. Cheong, N. Samarth, et A. Mascarenhas, 2002, Spectroscopic determination of hole density in the ferromagnetic semiconductor $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, *Phys. Rev. B* **66**, 033202
- Sinova, Jairo, T. Jungwirth et John Cerny, 2004, Magneto-transport and magneto-optical properties of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors : A review, cond-mat/0402568
- Smith, Alpheus W. et R. W. Sears, 1929, The Hall Effect in Permalloy, *Phys. Rev.* **34**, 1466
- Smit, J., 1958, The spontaneous hall effect in ferromagnetics II, *Physica* **24**, 39
- Takahashi, Masao et Kazuhiro Mitsui, 1996, Single-site approximation for the s-f model in ferromagnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **54**, 11298
- Takahashi, Masao, 2004, Optical band edge of diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* **70**, 035207
- Takamura, K., F. Matsukura, D. Chiba et H. Ohno, 2002, Magnetic properties of $(\text{Al,Ga,Mn})\text{As}$, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2590
- Taylor, P. T. et O. Heinonen, 2002, A quantum approach to condensed matter physics, Cambridge University press
- Thevenard, L., L. Largeau, O. Mauguin et A. Lemaître, 2005, Tuning the ferromagnetic properties of hydrogenated GaMnAs , *arXiv :cond-mat/0504387*
- Van Esch, A., J. De Boeck, L. Van Bockstal, R. Bogaerts, F. Herlach et G. Borghs , 1997 (a), Magnetotransport and magnetization properties of p-type $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ diluted magnetic semiconductor, *J. Phys : Condens. Matter* **9**, L361
- Van Esch, A., L. Van Bockstal, J. De Boeck, G. Verbanck, A. S. van Steenbergen, P. J. Wellmann, B. Grietens, R. Bogaerts, F. Herlach et G. Borghs , 1997 (b), Interplay between the magnetic and transport properties in the III-V diluted magnetic semiconductor $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, *Phys. Rev B* **56**, 13103

- van Kesteren, H. W., E. C. Cosman, W. A. J. A. van der Poel et C. T. Foxon , 1990, Fine structure of excitons in type-II GaAs/AlAs quantum wells, *Phys. Rev B* **41** 5283, 13103
- Velicky, B., S. Kirkpatrick et H. Ehrenreich, 1968, Single-site approximation in the electronic theory of simple binary alloys , *Phys. Rev.* **175**, 747
- Willmann, F., S. Suga, W. Dreybrodt et K. Cho, 1974, Magneto-reflectance of the 1S exciton ground states in InP and GaAs, *Solid Stat Commun.* **14**, 783
- Yu, Peter Y. et Manuel Cardona, 2001, Fundamentals of Semiconductors 3rd Ed., Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York
- Yu, K. M., W. Walukiewicz, T. Wojtowicz, W. L. Lim, X. Liu, Y. Sasaki, M. Dobrowolska et J. K. Furdyna, 2002, Determination of free hole concentration in ferromagnetic $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ using electrochemical capacitance-voltage profiling , *App. Phys. Lett.* **81**, 844

ANNEXE I

FORMULE DE KUBO POUR LA CONDUCTIVITÉ

I.1 Expression générale pour un problème à N-corps

Commençons par rappeler quelques relations bien connues de la mécanique quantique (Cohen-Tannoudji et al., 1998). Si f est un opérateur, la moyenne thermique de celui-ci s'écrit comme

$$\langle f \rangle_{Th} = \text{Tr}\{f\hat{\rho}\}, \quad (\text{I.1})$$

avec $\hat{\rho}$, l'opérateur densité, donné par

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H}{k_B T}}, \quad (\text{I.2})$$

où $Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{H}{k_B T}} \right\}$ est la fonction de partition.

De plus, nous savons que le taux de changement dans le temps d'un opérateur peut être écrit comme

$$i\hbar \dot{g} = [H, g]. \quad (\text{I.3})$$

Nous voulons étudier un système physique soumis à un champ électrique variant périodiquement dans le temps et de faible intensité. Nous allons donc écrire l'Hamiltonien comme $H = H_0 + V(t)$, où H_0 représente le cas où il n'y a pas de champ et $V(t)$ est la perturbation associée à un champ externe. Nous appliquons celle-ci à $t = -\infty$ et nous l'augmentons adiabatiquement jusqu'à sa valeur nominale à $t = 0$.

Nous pouvons écrire la partie dépendante du temps comme

$$V(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0} [e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} e^{-i\omega t + \eta t}], \quad (\text{I.4})$$

où la charge

$$e = \begin{cases} +|e| & \text{si les charges sont des trous} \\ -|e| & \text{si les charges sont des électrons.} \end{cases} \quad (\text{I.5})$$

Nous allons maintenant, à l'aide de (I.3), étudier le taux de changement de l'opérateur densité. Séparons premièrement celui-ci en deux parties, soient $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}$ et, ainsi,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}) &= [H, \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}] \\ i\hbar \dot{\hat{\rho}}_0 + i\hbar \dot{\delta\hat{\rho}} &= [H, \hat{\rho}_0] + [H, \delta\hat{\rho}] \\ &= \underbrace{[H_0, \hat{\rho}_0]}_{i\hbar \dot{\hat{\rho}}_0} + [V(t), \hat{\rho}_0] + [H_0 + V(t), \delta\hat{\rho}], \end{aligned} \quad (\text{I.6})$$

ce qui donne

$$i\hbar \dot{\delta\hat{\rho}} \approx [V(t), \hat{\rho}_0] + [H_0, \delta\hat{\rho}], \quad (\text{I.7})$$

car, $V(t)$ et $\delta\hat{\rho}$ étant faibles, nous négligeons $[V(t), \delta\hat{\rho}]$.

La solution de cette équation est (Kubo, 1957; Jones et March (a), 1973; Jones et March (b), 1973)

$$\delta\hat{\rho} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{\frac{iH_0(t'-t)}{\hbar}} [V(t'), \hat{\rho}_0] e^{\frac{iH_0(t'-t)}{\hbar}} dt'. \quad (\text{I.8})$$

En posant $t_1 = t' - t$, nous obtenons

$$\delta\hat{\rho} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{\frac{iH_0 t_1}{\hbar}} [V(t_1 + t), \hat{\rho}_0] e^{\frac{-iH_0 t_1}{\hbar}} dt_1. \quad (\text{I.9})$$

En remplaçant $V(t_1 + t)$ dans l'équation précédente par (I.4) et sachant que

$$[e\mathbf{r}, \hat{\rho}_0] \cdot \mathbf{E} = e\mathbf{r}\hat{\rho}_0 \cdot \mathbf{E} - \hat{\rho}_0 e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = [e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}, \hat{\rho}_0], \quad (\text{I.10})$$

nous obtenons

$$\delta\hat{\rho} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 \left\{ e^{\frac{iH_0 t_1}{\hbar}} [e\mathbf{r}, \hat{\rho}_0] e^{\frac{-iH_0 t_1}{\hbar}} \cdot \mathbf{E} \right\} e^{(-i\omega + \eta)(t_1 + t)} dt_1 \right). \quad (\text{I.11})$$

La valeur de la perturbation atteint sa valeur nominale à $t = 0$ et, en régime permanent, $\delta\hat{\rho}$ ne change plus aux temps subséquents. Nous avons ainsi, en renommant t_1 par t

$$\delta\hat{\rho}(t = 0) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\omega t + \eta t} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} [e\mathbf{r}, \hat{\rho}_0] e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \cdot \mathbf{E} \right). \quad (\text{I.12})$$

Le courant doit être calculé, puisque le transport est la quantité d'intérêt : $\langle J \rangle_{Th} = \text{Tr}\{J\delta\hat{\rho}(t = 0)\}$.

$$\langle J \rangle_{Th} = \frac{1}{i\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\omega t + \eta t} \text{Tr} \left\{ J e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} [e\mathbf{r}, \hat{\rho}_0] e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \right\} \cdot \mathbf{E} \quad (\text{I.13})$$

Ceci permet de définir la conductivité comme

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\omega t + \eta t} K_{\mu\nu}, \quad (\text{I.14})$$

où

$$K_{\mu\nu} = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ J_{\mu} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} [e\mathbf{r}_{\nu}, \hat{\rho}_0] e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \right\}. \quad (\text{I.15})$$

Nous allons réécrire l'équation précédente sous une forme un peu différente, qui est celle présentée habituellement dans la littérature.

$$\begin{aligned}
[r_\nu, \hat{\rho}_0] &= \hat{\rho}_0(\hat{\rho}_0^{-1} r_\nu \hat{\rho}_0 - r_\nu) \\
&= \hat{\rho}_0 \left(e^{\frac{H_0}{k_B T}} r_\nu e^{-\frac{H_0}{k_B T}} - r_\nu \right) \\
&= \hat{\rho}_0 \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda \frac{d}{d\lambda} (e^{\lambda H_0} r_\nu e^{-\lambda H_0}) \\
&= \hat{\rho}_0 \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda e^{\lambda H_0} \underbrace{[H_0, r_\nu]}_{i\hbar \dot{r}} e^{-\lambda H_0}
\end{aligned} \tag{I.16}$$

Comme l'opérateur courant est $J_\nu = \frac{e\hat{V}_\nu}{\Omega}$,

$$[er_\nu, \hat{\rho}_0] = i\hbar\Omega\hat{\rho}_0 \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda e^{\lambda H_0} J_\nu e^{-\lambda H_0} \tag{I.17}$$

et donc

$$\begin{aligned}
K_{\mu\nu} &= \Omega \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda \text{Tr} \left\{ J_\mu \hat{\rho}_0 e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{\lambda H_0} J_\nu e^{-\lambda H_0} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \right\} \\
&= \Omega \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda \text{Tr} \{ J_\mu(0) \hat{\rho}_0 J_\nu(t - i\hbar\lambda) \}.
\end{aligned} \tag{I.18}$$

Finalement, la conductivité prend la forme suivante :

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \Omega \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i\omega t + \eta t} \int_0^{\frac{1}{k_B T}} d\lambda \text{Tr} \{ J_\mu(0) \hat{\rho}_0 J_\nu(t - i\hbar\lambda) \}. \tag{I.19}$$

Cette dernière équation est appelée formule de Kubo (Kubo, 1956; Kubo, 1957) pour le tenseur de conductivité.

I.2 Cas d'un Hamiltonien à une particule

Bien que nous pouvons utiliser (I.19) pour obtenir la conductivité pour un Hamiltonien à une particule, nous allons plutôt utiliser (I.14), bien qu'évidemment les deux formes sont strictement équivalentes.

Supposons $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$, deux états propres quelconques de H_0 :

$$\begin{aligned} H_0|\alpha\rangle &= \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \\ H_0|\beta\rangle &= \varepsilon_\beta|\beta\rangle. \end{aligned} \quad (\text{I.20})$$

Nous pouvons réécrire (I.15)

$$\begin{aligned} K_{\mu\nu} &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ J_\mu e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} (e r_\nu \hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0 e r_\nu) e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} \right\} \\ &= \frac{e}{i\hbar} \sum_\alpha \left[\langle \alpha | J_\mu e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} r_\nu \hat{\rho}_0 e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} | \alpha \rangle - \langle \alpha | J_\mu e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{\rho}_0 r_\nu e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} | \alpha \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

En insérant une relation de fermeture $\sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta| = 1$ ainsi qu'en se rappelant que pour un Hamiltonien à un électron $\hat{\rho}_0|m\rangle = f(\varepsilon_m)|m\rangle$ où $f(\varepsilon_m)$ est la fonction de Fermi-Dirac, nous obtenons

$$\begin{aligned} K_{\mu\nu} &= \frac{e}{i\hbar} \sum_{\alpha,\beta} \left[\langle \alpha | J_\mu e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} | \beta \rangle \langle \beta | r_\nu \hat{\rho}_0 e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} | \alpha \rangle - \langle \alpha | J_\mu e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{\rho}_0 | \beta \rangle \langle \beta | r_\nu e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} | \alpha \rangle \right] \\ &= \frac{e}{i\hbar} \sum_{\alpha,\beta} \langle \alpha | J_\mu | \beta \rangle \langle \beta | r_\nu | \alpha \rangle e^{\frac{i t}{\hbar}(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha)} [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)]. \end{aligned} \quad (\text{I.22})$$

La conductivité s'écrit donc

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\alpha,\beta} \frac{e}{i\hbar} \langle \alpha | J_\mu | \beta \rangle \langle \beta | r_\nu | \alpha \rangle [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)] \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i t}{\hbar}(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha - \hbar\omega - i\hbar\eta)} \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0} e \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle \alpha | J_\mu | \beta \rangle \langle \beta | r_\nu | \alpha \rangle}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha - \hbar\omega - i\hbar\eta} [f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)]. \end{aligned} \quad (\text{I.23})$$

Comme $i\hbar\hat{V}_\nu = [H_0, r_\nu]$, nous pouvons facilement démontrer que

$$\langle \beta | r_\nu | \alpha \rangle = \frac{i\hbar \langle \beta | \hat{V}_\nu | \alpha \rangle}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}. \quad (\text{I.24})$$

Ainsi, remplaçant (I.24) dans (I.23), en posant $\hbar\eta \equiv \delta$ et en utilisant $J_\mu = \frac{e\hat{V}_\mu}{\Omega}$, nous obtenons

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{i\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle \alpha | \hat{V}_\mu | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_\nu | \alpha \rangle}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\delta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}, \quad (\text{I.25})$$

qui est l'expression de la conductivité pour un milieu physique d'écrit par un Hamiltonien à une particule.

ANNEXE II

CONDUCTIVITÉ DANS L'APPROCHE TB

Dans l'Annexe I, nous avons obtenu la formule de Kubo pour la conductivité dans le cas d'un Hamiltonien à une particule. Son expression est

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{i\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle \alpha | \hat{V}_\mu | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_\nu | \alpha \rangle}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\delta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}, \quad (\text{II.1})$$

où l'opérateur vitesse s'exprime comme

$$\hat{V}_\mu = -\frac{i}{\hbar} [H_0, r_\mu] \quad \text{avec} \quad r_\mu = \sum_i |i\rangle \mathbf{R}_i^\mu \langle i|. \quad (\text{II.2})$$

Si l'Hamiltonien H_0 correspond à $H_{tot} - H_{d-B}$ du Chapitre 4, c'est-à-dire n'ayant qu'un seul terme non-diagonal, l'opérateur vitesse se réduit à

$$\hat{V}_\mu = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i,j} |i\rangle (\mathbf{R}_j^\mu - \mathbf{R}_i^\mu) t_{ij} \langle j|, \quad (\text{II.3})$$

ce qui mène à

$$\begin{aligned} \hat{V}_x &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} |m\rangle R_{mn}^X t_{mn} \langle n| \\ \hat{V}_y &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{p,l} |p\rangle R_{pl}^Y t_{pl} \langle l| \\ \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} \langle \alpha | m \rangle R_{mn}^X t_{mn} \langle n | \beta \rangle \\ \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{p,l} \langle \beta | p \rangle R_{pl}^Y t_{pl} \langle l | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

Nous pouvons ainsi écrire

$$\langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle = \frac{-1}{\hbar^2} \sum_{m,n,p,l} R_{mn}^X t_{mn} \langle n | \beta \rangle \langle \beta | p \rangle R_{pl}^Y t_{pl} \langle l | \alpha \rangle \langle \alpha | m \rangle. \quad (\text{II.5})$$

II.1 Élément non-diagonal

Avant d'utiliser l'expression précédente, travaillons un peu l'équation (II.1). En effet, pour le calcul du coefficient de Hall, nous avons besoin de la partie réelle et donc du terme antisymétrique du tenseur de conductivité (voir chapitre 1), donné par

$$\sigma_{xy}^a = \frac{1}{2} (\sigma_{xy} - \sigma_{yx}^*). \quad (\text{II.6})$$

Nous écrivons à l'aide de (II.1)

$$\sigma_{xy}^a = \frac{1}{2} \left[\frac{i\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\delta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha} + \frac{\langle \alpha | \hat{V}_y | \beta \rangle^* \langle \beta | \hat{V}_x | \alpha \rangle^*}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega - i\delta} \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha} \right) \right]. \quad (\text{II.7})$$

L'opérateur vitesse étant une observable, nous avons

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{V}_y | \beta \rangle^* \langle \beta | \hat{V}_x | \alpha \rangle^* &= \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \\ &= \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle, \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

ce qui permet de réécrire

$$\sigma_{xy}^a = \frac{\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \frac{1}{2} \left[i \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle \left\{ \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + \hbar\omega + i\delta} + c.c \right\} \right. \\ \left. \cdot \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha} \right], \quad (\text{II.9})$$

qui devient, pour le cas DC ($\omega = 0$),

$$\sigma_{xy}^a(\omega = 0) = \frac{\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} -i \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle \frac{f(\varepsilon_\alpha) - f(\varepsilon_\beta)}{(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha)^2 + \delta^2}. \quad (\text{II.10})$$

Commençons par éliminer ε_α et ε_β en introduisant des intégrales sur des fonctions delta de Dirac. Notons qu'à partir de maintenant, par contrainte d'espace, nous allons écrire $\sigma_{xy}^a(\omega = 0) \rightarrow \sigma_{xy}^a$. Ainsi,

$$\sigma_{xy}^a = \frac{\hbar e^2}{\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \sum_{\alpha, \beta} -i \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle \frac{f(\varepsilon_2) - f(\varepsilon_1)}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 + \delta^2} \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta) \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_\alpha). \quad (\text{II.11})$$

En utilisant (II.5), nous pouvons écrire

$$\sum_{\alpha, \beta} -i \langle \alpha | \hat{V}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{V}_y | \alpha \rangle \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta) \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_\alpha) \\ = \frac{i}{\hbar^2} \sum_{m, n, p, l} R_{mn}^X t_{mn} \langle n | \left[\sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta| \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta) \right] | p \rangle R_{pl}^Y t_{pl} \langle l | \left[\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_\alpha) \right] | m \rangle \\ \equiv \frac{1}{\hbar^2} \sum_{m, n, p, l} \Upsilon_{m, n, p, l}^{\alpha, \beta}, \quad (\text{II.12})$$

ce qui permet d'exprimer (II.11) comme

$$\sigma_{xy}^a = \frac{e^2}{\hbar\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_2) - f(\varepsilon_1)}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 + \delta^2} \sum_{m,n,p,l} \Upsilon_{m,n,p,l}^{\alpha,\beta}. \quad (\text{II.13})$$

Sachant que $\delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta) = -\frac{1}{2\pi i} (\hat{G}_\beta^r - \hat{G}_\beta^a) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\hat{G}_\beta^r\}$ où $\hat{G}_\beta^{r,a} = \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta \pm i0^+}$, nous avons

$$\begin{aligned} \langle n | \left[\sum_\beta |\beta\rangle \langle \beta| \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_\beta) \right] | p \rangle &= -\frac{1}{\pi} \langle n | \left[\sum_\beta |\beta\rangle \langle \beta| \text{Im}\{\hat{G}_\beta^r\} \right] | p \rangle \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{np}^r(\varepsilon_1)\}. \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

$\Upsilon_{m,n,p,l}^{\alpha,\beta}$ peut donc s'écrire, grâce à (II.14), comme

$$\Upsilon_{m,n,p,l}^{\alpha,\beta} = \frac{i}{\pi^2} R_{mn}^X t_{mn} \text{Im}\{G_{np}^r(\varepsilon_1)\} R_{pl}^Y t_{pl} \text{Im}\{G_{lm}^r(\varepsilon_2)\}. \quad (\text{II.15})$$

En définissant $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \equiv -\sum_{m,n,p,l} \Upsilon_{m,n,p,l}^{\alpha,\beta}$ nous obtenons

$$\sigma_{xy}^a(\omega = 0) = \frac{e^2}{\hbar\Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_1) - f(\varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + \delta^2} F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2). \quad (\text{II.16})$$

Concentrons-nous maintenant un peu sur la fonction $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$. L'intégrale de saut en présence d'un champ magnétique est

$$t_{ij} = t_{ij}^0 e^{\frac{-ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_i)} \equiv e^{-if_{ij}}. \quad (\text{II.17})$$

L'effet principal du champ magnétique est de changer la phase relative entre deux points spatiaux et, ainsi, la fonction de Green qui décrit la propagation entre ces points verra sa phase relative changer. Matsubara et Kaneyoshi (Matsubara et Kaneyoshi, 1968) ont montré qu'en champ faible, il est possible d'écrire

$$\text{Im}\{G_{ij}^r(z)\} \approx e^{\frac{-ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_i)} \text{Im}\{G_{ij}^{r,0}(z)\}, \quad (\text{II.18})$$

où $G_{ij}^{r,0}(z)$ est la fonction de Green calculée avec $t_{ij} = t_{ij}^0$.

Nous réécrivons $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ en utilisant ces relations :

$$\begin{aligned} F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) &= -\frac{i}{\pi^2} \sum_{m,n,p,l} R_{mn}^X t_{mn}^0 \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} R_{pl}^Y t_{pl}^0 \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\} e^{-i(f_{mn}+f_{np}+f_{pl}+f_{lm})} \\ &\equiv -\frac{i}{\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) e^{-i(f_{mn}+f_{np}+f_{pl}+f_{lm})} \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Nous pouvons facilement montrer que

$$f_{mn} + f_{np} + f_{pl} + f_{lm} = \frac{-e}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\} \quad (\text{II.20})$$

et, ainsi,

$$F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = -\frac{i}{\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) e^{\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\}}. \quad (\text{II.21})$$

Comme nous cherchons à trouver une expression pour l'effet Hall, nous voulons un terme linéaire en champ magnétique. Pour ce faire, développons l'exponentielle en série et arrêtons-nous au terme d'ordre un.

$$e^{\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\}} = 1 + \frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\} + O(H^2) \quad (\text{II.22})$$

Ainsi, $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ devient

$$\begin{aligned} F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) &= \frac{-i}{\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \left[1 + \right. \\ &\quad \left. \frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

Puisque les vecteurs \mathbf{R}_{mn}^x et \mathbf{R}_{pl}^y sont indépendants, les premier terme est nul, car la sommation comprend autant de valeurs identiques, mais de signe opposé

($\sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = 0$). La fonction $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ se réduit donc à

$$F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{e}{2\hbar\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \left[\mathbf{B} \cdot \left\{ (\mathbf{R}_{pl} \times \mathbf{R}_{lm}) + (\mathbf{R}_{mn} \times \mathbf{R}_{np}) \right\} \right] \Pi_{m,n,p,l}^{x,y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2). \quad (\text{II.24})$$

L'induction magnétique est composée du champ externe dirigé en z et du champ créé par l'effet spin-orbite (Chapitre 4).

$$\mathbf{B} = (B_z^0 + B_{so})\hat{z} \equiv B\hat{z}, \quad (\text{II.25})$$

ce qui se traduit par

$$F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{eB}{2\hbar\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \left(R_{pl}^x R_{lm}^y - R_{pl}^y R_{lm}^x + R_{mn}^x R_{np}^y - R_{mn}^y R_{np}^x \right) \\ * R_{mn}^X t_{mn}^0 \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} R_{pl}^Y t_{pl}^0 \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\}. \quad (\text{II.26})$$

En développant terme à terme,

$$F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{eB}{2\hbar\pi^2} \sum_{m,n,p,l} \left[\underbrace{(R_{mn}^x)^2 t_{mn}^0 R_{np}^y \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} R_{pl}^y t_{pl}^0 \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\}}_{\text{I}} \right. \\ - \underbrace{R_{mn}^x R_{mn}^y t_{mn}^0 R_{np}^x \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} R_{pl}^y t_{pl}^0 \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\}}_{\text{II}} \\ + \underbrace{R_{mn}^x t_{mn}^0 \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} R_{pl}^x R_{pl}^y t_{pl}^0 R_{lm}^y \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\}}_{\text{III}} \\ \left. - \underbrace{R_{mn}^x t_{mn}^0 \text{Im}\{G_{np}^{r,0}(\varepsilon_1)\} (R_{pl}^y)^2 t_{pl}^0 R_{lm}^x \text{Im}\{G_{lm}^{r,0}(\varepsilon_2)\}}_{\text{IV}} \right]. \quad (\text{II.27})$$

Sachant que

$$t_{ij}^0 = \frac{1}{N} \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}} \varepsilon_k, \quad (\text{II.28})$$

nous pouvons écrire les égalités suivantes (Malwah et Bene, 1972) :

$$\begin{aligned} R_{ij}^x t_{ij}^0 &= \frac{i}{N} \sum_k \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}} \\ R_{ij}^x R_{ij}^y t_{ij}^0 &= \frac{-1}{N} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}} \\ (R_{ij}^x)^2 t_{ij}^0 &= \frac{-1}{N} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}} \\ (R_{ij}^y)^2 t_{ij}^0 &= \frac{-1}{N} \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_y^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}}. \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

Aussi, en définissant, par souci de simplicité de notation, $\text{Im}\{G_{ij}^{r,0}(z)\} \equiv G_{ij}^I(z)$ et $\text{Re}\{G_{ij}^{r,0}(z)\} \equiv G_{ij}^R(z)$, nous avons

$$G_{kk'}^I(z) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} G_{ij}^I(z). \quad (\text{II.30})$$

Pour calculer les quatre termes de (II.27), la même démarche doit être employée.

Nous présentons ici le calcul de **I** comme exemple.

$$\begin{aligned} & \sum_{m,n,p,l} (R_{mn}^x)^2 t_{mn}^0 R_{np}^y G_{np}^I(\varepsilon_1) R_{pl}^y t_{pl}^0 G_{lm}^I(\varepsilon_2) \\ &= \sum_{m,n,p,l} \left[-\frac{1}{N} \right] \sum_k \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{mn}} R_{np}^y G_{np}^I(\varepsilon_1) \left[\frac{i}{N} \right] \sum_{k'} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{pl}} G_{lm}^I(\varepsilon_2) \\ &= \sum_{k,k'} \frac{-i}{N^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y} \sum_{n,p} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} R_{np}^y G_{np}^I(\varepsilon_1) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_p} \sum_{l,m} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_l} G_{lm}^I(\varepsilon_2) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} \\ &= \sum_{k,k'} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y} G_{k'k}^I(\varepsilon_2) \left[\frac{\partial}{\partial k_y} + \frac{\partial}{\partial k'_y} \right] G_{kk'}^I(\varepsilon_1) \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

L'équation (II.27) va maintenant s'écrire

$$\begin{aligned}
 F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{eB}{2\hbar\pi^2} \sum_{k,k'} \left[\right. & \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y} G_{k'k}^I(\varepsilon_2) \left[\frac{\partial}{\partial k_y} + \frac{\partial}{\partial k'_y} \right] G_{kk'}^I(\varepsilon_1) \\
 & - \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y} G_{k'k}^I(\varepsilon_2) \left[\frac{\partial}{\partial k_x} + \frac{\partial}{\partial k'_x} \right] G_{kk'}^I(\varepsilon_1) \\
 & + \frac{\partial^2 \varepsilon_{k'}}{\partial k'_x \partial k'_y} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} G_{kk'}^I(\varepsilon_1) \left[\frac{\partial}{\partial k'_y} + \frac{\partial}{\partial k_y} \right] G_{k'k}^I(\varepsilon_2) \\
 & \left. - \frac{\partial^2 \varepsilon_{k'}}{\partial k'_y^2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} G_{kk'}^I(\varepsilon_1) \left[\frac{\partial}{\partial k'_x} + \frac{\partial}{\partial k_x} \right] G_{k'k}^I(\varepsilon_2) \right].
 \end{aligned} \tag{II.32}$$

Comme le système que nous étudions est désordonné, nous voulons calculer la moyenne sur toutes les configurations atomiques possibles $\langle F_{xy} \rangle$. Ceci implique de moyenner le produit de deux fonctions de Green. Nous allons utiliser le découplage suivant, équivalent à l'approximation de la phase aléatoire (RPA (*Random Phase Approximation*)) :

$$\begin{aligned}
 \langle G_{kk'} G_{k'k} \rangle &= \langle G_{kk'} \rangle \langle G_{k'k} \rangle + \left[\langle G_{kk'} G_{k'k} \rangle - \langle G_{kk'} \rangle \langle G_{k'k} \rangle \right] \\
 &\approx \langle G_{kk'} \rangle \langle G_{k'k} \rangle.
 \end{aligned} \tag{II.33}$$

En terme de théorie à N-corps, nous négligeons les corrections de vertex. Dans (II.33), $\langle G_{kk'} \rangle$ est diagonal dans l'espace k , donc (II.32) devient

$$\begin{aligned} \langle F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle = \frac{eB}{2\hbar\pi^2} \sum_k \left[\right. & 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \frac{\partial}{\partial k_y} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & - 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \frac{\partial}{\partial k_x} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & + 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \frac{\partial}{\partial k_y} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \\ & \left. - 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_y^2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \frac{\partial}{\partial k_x} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.34})$$

Nous rappelant la définition de $\langle G \rangle$ donnée par la CPA (4.16), nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon) \rangle\} &= \frac{i}{2} \left[\langle G_k^{r,0}(\varepsilon) \rangle - \langle G_k^{a,0}(\varepsilon) \rangle \right] \\ &= \frac{i}{2} \left[\left\langle \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\delta} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k - i\delta} \right\rangle \right] \\ &= \frac{i}{2} \left[\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k - \Sigma} - \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k - \Sigma^*} \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.35})$$

Nous pouvons aussi montrer, sans difficulté, que

$$\frac{\partial}{\partial k_\alpha} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon) \rangle\} = 2 \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_\alpha} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon) \rangle\} \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon) \rangle\}, \quad (\text{II.36})$$

ce qui permet d'écrire (II.34) sous la forme

$$\begin{aligned} \langle F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle = \frac{eB}{2\hbar\pi^2} \sum_k \left[\right. & 4 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x^2} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \right)^2 \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & - 4 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & + 4 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_x \partial k_y} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \\ & \left. - 4 \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_y^2} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right)^2 \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right], \end{aligned}$$

où

$$\varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \equiv \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\}. \quad (\text{II.37})$$

En utilisant les définitions de la masse effective et de la vitesse, dans l'espace k

$$\begin{aligned} M_{\mu\nu}^{-1} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial k_\mu \partial k_\nu} \\ V_\mu &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_\mu}, \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle = \frac{eB\hbar^4}{2\hbar\pi^2} \sum_k \left[\right. & 4 \left\{ \frac{V_y^2}{M_{xx}} - \frac{V_x V_y}{M_{xy}} \right\} \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & - 4 \left\{ \frac{V_x^2}{M_{yy}} - \frac{V_x V_y}{M_{xy}} \right\} \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \left. \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

Si nous considérons que, dans le problème étudié, les directions x et y sont équivalentes, nous pouvons simplifier encore (II.39), qui devient

$$= \frac{eB\hbar^3}{\pi^2} \sum_k \left\{ \frac{V_x^2}{M_{yy}} + \frac{V_y^2}{M_{xx}} - 2 \frac{V_x V_y}{M_{xy}} \right\} \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \left[\text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} - \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right], \quad (\text{II.40})$$

que nous écrivons finalement

$$\langle F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle = \frac{eB\hbar^3}{\pi^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \left[\text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} - \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right]. \quad (\text{II.41})$$

En insérant le $\langle F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle$ que nous venons d'obtenir dans l'expression de la conductivité (II.16), nous obtenons une équation qui contient quatre termes :

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{xy}^a \rangle = \frac{e^3 \hbar^2 B}{\pi^2 \Omega} & \left[\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_1)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \right. \\ & - \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_1)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \\ & - \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ & \left. + \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right]. \quad (\text{II.42}) \end{aligned}$$

Dans les deux dernières intégrales, effectuons le changement de variable $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2$.

Nous obtenons

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^a = 2 \frac{e^3 \hbar^2 B}{\pi^2 \Omega} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{f(\varepsilon_1)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) & \left[\text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \right. \\ & \left. - \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_2) \rangle\} \right], \quad (\text{II.43}) \end{aligned}$$

qui peut aussi s'écrire

$$\sigma_{xy}^a = 2 \frac{e^3 \hbar^2 B}{\pi^2 \Omega} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \left[\frac{f(\varepsilon_1) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \operatorname{Re}\{G_k^{r,0}(\varepsilon_1)\}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} - \frac{f(\varepsilon_1) \varrho_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \operatorname{Re}\{G_k^{r,0}(\varepsilon_2)\}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \right]. \quad (\text{II.44})$$

Dans le but de simplifier l'équation précédente, nous allons maintenant développer une série de relations basées, entre autres, sur la dépendance entre les parties réelle et imaginaire d'une fonction de Green, soit

$$\operatorname{Re}\{G_k^r(\varepsilon_1)\} = \frac{1}{\pi} \int \frac{\operatorname{Im}\{G_k^r(\varepsilon_2)\} d\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \quad (\text{II.45})$$

Étant donné la relation précédente et l'existence de l'équation de Dyson, nous savons que l'expression suivante est aussi vraie

$$\operatorname{Re}\{[G_k^r(\varepsilon_1)]^2\} = \frac{1}{\pi} \int \frac{\operatorname{Im}\{[G_k^r(\varepsilon_2)]^2\} d\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \quad (\text{II.46})$$

De plus, une fonction de Green retardée ou avancée étant un objet complexe, nous avons

$$\begin{aligned} [G_k^r(\varepsilon)]^2 &= [\operatorname{Re}\{G_k^r(\varepsilon)\}]^2 - [\operatorname{Im}\{G_k^r(\varepsilon)\}]^2 + 2i \operatorname{Re}\{G_k^r(\varepsilon)\} \operatorname{Im}\{G_k^r(\varepsilon)\} \\ \operatorname{Re}\{[G_k^r(\varepsilon)]^2\} &= [\operatorname{Re}\{G_k^r(\varepsilon)\}]^2 - [\operatorname{Im}\{G_k^r(\varepsilon)\}]^2 \\ \operatorname{Im}\{[G_k^r(\varepsilon)]^2\} &= 2 \operatorname{Re}\{G_k^r(\varepsilon)\} \operatorname{Im}\{G_k^r(\varepsilon)\}. \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

Nous pouvons, à partir de cela, énumérer les relations suivantes :

a)

$$\pi \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \text{Re}\{G_k^r(\varepsilon_1)\} = \int \frac{\text{Im}\{G_k^r(\varepsilon_2)\} d\varepsilon_2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2} \quad (\text{II.48})$$

b)

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \text{Re}\{[G_k^r(\varepsilon_1)]^2\} &= \frac{1}{2} \int \frac{\text{Im}\{[G_k^r(\varepsilon_2)]^2\} d\varepsilon_2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2} \\ &= \int \frac{\text{Re}\{G_k^r(\varepsilon_2)\} \text{Im}\{G_k^r(\varepsilon_2)\} d\varepsilon_2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2} \end{aligned} \quad (\text{II.49})$$

Insérons (II.48) et (II.49) dans (II.44) :

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^a &= A \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int d\varepsilon_1 f(\varepsilon_1) \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \\ &\quad \left[\pi \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \text{Re}\{[\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle]^2\} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.50})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^a &= A \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int d\varepsilon_1 f(\varepsilon_1) \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \left[\frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} [\text{Re}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\}]^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \text{Re}\{[\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle]^2\} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.51})$$

$$\sigma_{xy}^a = \frac{\pi A}{2} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int d\varepsilon_1 f(\varepsilon_1) \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} [\text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\}]^2, \quad (\text{II.52})$$

où $A \equiv 2 \frac{e^3 \hbar^2 B}{\pi^2 \Omega}$.

Sachant que

$$\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} [\text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\}]^3 = \text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} [\text{Im}\{\langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle\}]^2, \quad (\text{II.53})$$

l'équation (II.52) devient

$$\sigma_{xy}^a = \frac{\pi A}{3} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int d\varepsilon_1 f(\varepsilon_1) \frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \left[\text{Im} \{ \langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle \} \right]^3. \quad (\text{II.54})$$

Finalement, l'équation précédente est intégrée par partie, ce qui donne

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^a &= \frac{\pi A}{3} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \left[f(\varepsilon_1) \left[\text{Im} \{ \langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle \} \right]^3 \right]_{-\infty}^{\infty} - \int \frac{\partial f(\varepsilon_1)}{\partial \varepsilon_1} \left[\text{Im} \{ \langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle \} \right]^3 d\varepsilon_1 \\ &= \frac{\pi A}{3} \sum_k \Gamma_{xy}(k) \int -\frac{\partial f(\varepsilon_1)}{\partial \varepsilon_1} \left[\text{Im} \{ \langle G_k^{r,0}(\varepsilon_1) \rangle \} \right]^3 d\varepsilon_1. \end{aligned} \quad (\text{II.55})$$

La dépendance en k de la fonction de Green étant au travers de la relation de dispersion ε_k , nous allons redéfinir la convention d'écriture de la fonction de Green moyennée sur toutes les configurations.

$$\langle G_k^r(E) \rangle \equiv \langle G^r(E, \varepsilon_k) \rangle \quad (\text{II.56})$$

L'expression finale de la conductivité de Hall, dans le modèle des liaisons fortes à une orbitale, en utilisant la CPA et le découplage RPA, s'exprime comme

$$\langle \sigma_{xy}^a(\omega = 0) \rangle = \frac{2e^3 \hbar^2 B}{3\pi \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_k \Gamma_{xy}(k) \left[\text{Im} \{ \langle G^{r,0}(E, \varepsilon_k) \rangle \} \right]^3. \quad (\text{II.57})$$

II.2 Éléments diagonal (magnéto-résistivité)

Pour le cas des éléments non-diagonaux, l'équation (II.23) montre clairement que s'il n'y a pas de champ magnétique, $F_{xy}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ est nul. Par contre, pour les éléments diagonaux, le terme indépendant du champ n'est pas nul. Comme le champ apporte

une contribution faible, nous allons négliger cette correction pour σ_{xx} , ce qui revient à utiliser dans le calcul $t_{ij} = t_{ij}^0$. L'effet du magnétisme intervient donc seulement dans la densité d'états au travers de la *self-energy*.

Nous pouvons écrire la conductivité longitudinale à partir de (II.1) en utilisant une démarche analogue à la sous-section précédente, ce qui donne

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{-ie^2}{\pi^2 \hbar \Omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{\sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 + \hbar\omega + i\delta} \frac{f(\varepsilon_2) - f(\varepsilon_1)}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}. \quad (\text{II.58})$$

Connaissant la relation $\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\delta} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$, la partie réelle de (II.58) est

$$\sigma_{xx}^R(\omega) = \frac{-e^2}{\pi \hbar \Omega} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \underbrace{\sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)}_{\equiv I} \frac{[f(\varepsilon_2) - f(\varepsilon_1)] \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1 + \hbar\omega)}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}. \quad (\text{II.59})$$

En utilisant la première relation de (II.29), le terme I peut s'écrire, dans l'espace k , comme

$$\sum_{m,n,p,l} \Pi_{m,n,p,l}^{x,x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = - \sum_{k,k'} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_x} \right) G_{kk'}^I(\varepsilon_1) G_{k'k}^I(\varepsilon_2). \quad (\text{II.60})$$

Effectuons maintenant l'intégration sur ε_1 et renommons ε_2 , E .

$$\sigma_{xx}^R(\omega) = \frac{e^2}{\pi \hbar \Omega} \int dE \sum_{k,k'} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial k'_x} \right) G_{kk'}^I(E + \hbar\omega) G_{k'k}^I(E) \frac{-[f(E + \hbar\omega) - f(E)]}{\hbar\omega} \quad (\text{II.61})$$

Il est maintenant temps de trouver l'expression DC pour la conductivité. Cette fois-ci, nous ne pouvons pas seulement poser $\omega = 0$ étant donné que l'intégrand divergerait. Nous allons plutôt prendre la limite de l'équation précédente lorsque

$\omega \rightarrow 0$, ce qui donne

$$\sigma_{xx}^R(\omega = 0) = \frac{e^2}{\pi \hbar \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_{k,k'} \left(\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon'_k}{\partial k'_x} \right) G_{kk'}^I(E) G_{k'k}^I(E). \quad (\text{II.62})$$

Il reste finalement à effectuer la moyenne sur toutes les configurations. En utilisant encore une fois (II.33) et (II.38), nous obtenons l'expression finale

$$\langle \sigma_{xx}^R(\omega = 0) \rangle = \frac{\hbar e^2}{\pi \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_k V_x^2 \left[\text{Im} \{ \langle G^{r,0}(E, \varepsilon_k) \rangle \} \right]^2. \quad (\text{II.63})$$

ANNEXE III

MATRICE T_M

Au Chapitre 4, nous avons obtenu l'expression de la matrice v_m . Nous allons présenter ici les étapes pour obtenir l'expression de t_{ss} que nous avons énoncée au Chapitre 4. Réécrivons l'égalité $t_m = v_m[I - G^0 v_m]^{-1}$ comme $t_m[I - G^0 v_m] = v_m$. Regardons en premier lieu la partie non magnétique, c'est-à-dire v_m^{NM} .

$$\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow}^{NM} & t_{\uparrow\downarrow}^{NM} \\ t_{\downarrow\uparrow}^{NM} & t_{\downarrow\downarrow}^{NM} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} G_{\uparrow}^0 & 0 \\ 0 & G_{\downarrow}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v'_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & v'_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} v'_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & v'_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow}^{NM} (1 - G_{\uparrow}^0 v'_{\uparrow\uparrow}) & t_{\uparrow\downarrow}^{NM} (1 - G_{\downarrow}^0 v'_{\downarrow\downarrow}) \\ t_{\downarrow\uparrow}^{NM} (1 - G_{\uparrow}^0 v'_{\uparrow\uparrow}) & t_{\downarrow\downarrow}^{NM} (1 - G_{\downarrow}^0 v'_{\downarrow\downarrow}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v'_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & v'_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (\text{III.1})$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\downarrow}^{NM} &= t_{\downarrow\uparrow}^{NM} = 0 \\ t_{\uparrow\uparrow}^{NM} &= \frac{v'_{\uparrow\uparrow}}{1 - G_{\uparrow}^0 v'_{\uparrow\uparrow}} \equiv \frac{V'_{\uparrow}}{1 - G_{\uparrow}^0 V'_{\uparrow}} \\ t_{\downarrow\downarrow}^{NM} &= \frac{v'_{\downarrow\downarrow}}{1 - G_{\downarrow}^0 v'_{\downarrow\downarrow}} \equiv \frac{V'_{\downarrow}}{1 - G_{\downarrow}^0 V'_{\downarrow}}. \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

Pour la partie magnétique, nous allons nous contenter de calculer les éléments diagonaux de la matrice t_m^M , étant donné que nous n'utilisons pas les autres. Comme

pour la partie non magnétique, nous écrivons

$$\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow}^M & t_{\uparrow\downarrow}^M \\ t_{\downarrow\uparrow}^M & t_{\downarrow\downarrow}^M \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} G_{\uparrow}^0 & 0 \\ 0 & G_{\downarrow}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{\uparrow\uparrow} & v_{\uparrow\downarrow} \\ v_{\downarrow\uparrow} & v_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} v_{\uparrow\uparrow} & v_{\uparrow\downarrow} \\ v_{\downarrow\uparrow} & v_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow}^M (1 - G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) - t_{\uparrow\downarrow}^M G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow} & t_{\uparrow\downarrow}^M (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}) - t_{\uparrow\uparrow}^M G_{\uparrow}^0 t_{\uparrow\downarrow}^M \\ t_{\downarrow\uparrow}^M (1 - G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) - t_{\downarrow\downarrow}^M G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow} & t_{\downarrow\downarrow}^M (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}) - t_{\downarrow\uparrow}^M G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{\uparrow\uparrow} & v_{\uparrow\downarrow} \\ v_{\downarrow\uparrow} & v_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (\text{III.3})$$

Prenons les éléments (1,1) et (1,2) de l'équation matricielle (III.3),

$$t_{\uparrow\uparrow}^M (1 - G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) - t_{\uparrow\downarrow}^M G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow} = v_{\uparrow\uparrow} \quad (\text{III.4})$$

$$t_{\uparrow\downarrow}^M (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}) - t_{\uparrow\uparrow}^M G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\downarrow} = v_{\uparrow\downarrow}, \quad (\text{III.5})$$

et effectuons la construction suivante : (III.4) $\times(G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow})^{-1} +$ (III.5) $\times(1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow})^{-1}$. Il est très important de noter que les différentes variables présentées ci-haut sont des opérateurs dans l'espace des états du spin localisé, ce qui signifie que ceux-ci ne commutent pas nécessairement entre eux, alors que, dans l'espace des positions et du spin de l'électron, ce sont des nombres. Nous devons en tenir compte dans les étapes du présent calcul de t_{ss}^M .

$$\begin{aligned} & t_{\uparrow\uparrow}^M (1 - G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) (G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow})^{-1} - t_{\uparrow\downarrow}^M G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow} (G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow})^{-1} \\ & + t_{\uparrow\downarrow}^M (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}) (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow})^{-1} - t_{\uparrow\uparrow}^M G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\downarrow} (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow})^{-1} \\ & = v_{\uparrow\uparrow} (G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow})^{-1} + v_{\uparrow\downarrow} (1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

$$t_{m\uparrow\uparrow}^M \left[(1 - G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) \frac{1}{G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow}} - (G_{\uparrow}^0 v_{\uparrow\downarrow}) \frac{1}{1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} \right] = v_{\uparrow\uparrow} \frac{1}{G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\uparrow}} + v_{\uparrow\downarrow} \frac{1}{1 - G_{\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} \quad (\text{III.7})$$

$$t_{m\uparrow\uparrow}^M \left[(1 - G_{\uparrow\uparrow}^0 v_{\uparrow\uparrow}) - (G_{\uparrow\downarrow}^0 v_{\uparrow\downarrow}) \frac{1}{1 - G_{\downarrow\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} (G_{\downarrow\uparrow}^0 v_{\downarrow\uparrow}) \right] = v_{\uparrow\uparrow} + v_{\uparrow\downarrow} \frac{1}{1 - G_{\downarrow\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} G_{\downarrow\uparrow}^0 v_{\downarrow\uparrow} \quad (\text{III.8})$$

Développons le terme $v_{\uparrow\downarrow} \frac{1}{1 - G_{\downarrow\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} v_{\downarrow\uparrow}$;

$$v_{\uparrow\downarrow} \frac{1}{1 - G_{\downarrow\downarrow}^0 v_{\downarrow\downarrow}} v_{\downarrow\uparrow} = \frac{J_{pd}^2}{4} S_m^- \frac{1}{a + b S_m^z} S_m^+, \quad (\text{III.9})$$

où $a = 1 - G_{\downarrow}^0 (E_M + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_{\downarrow})$ et $b = G_{\downarrow}^0 \frac{J_{pd}}{2}$.

Supposons que l'on peut écrire $\frac{1}{a + b S_m^z} S_m^+ \equiv S_m^+ g(S_m^z)$ et trouvons la fonction $g(S_m^z)$, si elle existe. Rappelons ici que $[S_m^z, S_m^+] = S_m^+ \rightarrow S_m^z S_m^+ = S_m^+ (S_m^z + 1)$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{a + b S_m^z} S_m^+ &\equiv S_m^+ g(S_m^z) \\ S_m^+ &= (a + b S_m^z) S_m^+ g(S_m^z) \\ S_m^+ &= S_m^+ (a + b (S_m^z + 1)) g(S_m^z) \\ 1 &= [a + b (S_m^z + 1)] g(S_m^z) \\ g(S_m^z) &= \frac{1}{a + b (S_m^z + 1)} \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \frac{1}{a + b S_m^z} S_m^+ &= S_m^+ \frac{1}{a + b (S_m^z + 1)} = S_m^+ \frac{1}{1 - G_{\downarrow}^0 (E_M - \frac{J_{pd}}{2} (S_m^z + 1) + \frac{g^*}{2} \mu_B B_m - \Sigma_{\downarrow})} \\ &\equiv S_m^+ \frac{1}{1 - G_{\downarrow}^0 U_{\downarrow}} \end{aligned} \quad (\text{III.11})$$

L'équation (III.9) donne donc

$$v_{\uparrow\downarrow} v_{\downarrow\uparrow} \frac{1}{1 - G_{\downarrow}^0 U_{\downarrow}}. \quad (\text{III.12})$$

Les variables $v_{\downarrow\downarrow}$ et $v_{\uparrow\uparrow}$ ne dépendent que de S^z , nous savons donc que $v_{\uparrow\uparrow}v_{\downarrow\downarrow} = v_{\downarrow\downarrow}v_{\uparrow\uparrow}$, ce qui n'est pas le cas lorsque S^\pm est présent. Renommons $v_{\uparrow\uparrow} = E_\alpha + \frac{J_{pd}}{2}S_m^z - \Sigma_\uparrow - \frac{g^*}{2}\mu_B B_m \equiv V_\uparrow$ et $v_{\downarrow\downarrow} = E_\alpha - \frac{J_{pd}}{2}S_m^z - \Sigma_\downarrow + \frac{g^*}{2}\mu_B B_m \equiv V_\downarrow$. Ensuite, calculons le produit $v_{\uparrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow}$, qui se traduit par le calcul de

$$v_{\uparrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow} = \frac{J_{pd}^2}{4}S_m^-S_m^+. \quad (\text{III.13})$$

Utilisons les propriétés des opérateurs d'échelles de spin pour réécrire (III.13) :

$$\begin{aligned} S_m^-S_m^+ &= (S_m^x - iS_m^y)(S_m^x + iS_m^y) \\ &= (S_m^x)^2 + (S_m^y)^2 + i[S_m^x, S_m^y] \\ &= (S_m^x)^2 + (S_m^y)^2 - S_m^z \\ &= S(S+1) - (S_m^z)^2 - S_m^z \end{aligned} \quad (\text{III.14})$$

En écrivant $v_{\uparrow\downarrow}v_{\downarrow\uparrow} \equiv W_\uparrow$ nous obtenons

$$W_\uparrow = \frac{J_{pd}^2}{4}[S(S+1) - (S_m^z)^2 - S_m^z]. \quad (\text{III.15})$$

En remplaçant (III.12) dans (III.8) et en utilisant les définitions précédentes, nous obtenons l'expression pour $t_{m\uparrow\uparrow}^M$. La même démarche est utilisée pour déterminer $t_{m\downarrow\downarrow}^M$ en définissant cette fois $U_\uparrow \equiv E_M + \frac{J_{pd}}{2}(S_m^z - 1) - \frac{g^*}{2}\mu_B B_m - \Sigma_\uparrow$ et $v_{\downarrow\uparrow}v_{\uparrow\downarrow} \equiv W_\downarrow = \frac{J_{pd}^2}{4}[S(S+1) - (S_m^z)^2 + S_m^z]$.

Les éléments de matrices sont :

$$\begin{aligned} t_{m\uparrow\uparrow}^M &= \frac{V_\uparrow - G_\downarrow^0(V_\uparrow U_\downarrow - W_\uparrow)}{1 - G_\uparrow^0 V_\uparrow - G_\downarrow^0 U_\downarrow + G_\uparrow^0 G_\downarrow^0 (V_\uparrow U_\downarrow - W_\uparrow)} \\ t_{m\downarrow\downarrow}^M &= \frac{V_\downarrow - G_\uparrow^0(U_\uparrow V_\downarrow - W_\downarrow)}{1 - G_\uparrow^0 U_\uparrow - G_\downarrow^0 V_\downarrow + G_\uparrow^0 G_\downarrow^0 (U_\uparrow V_\downarrow - W_\downarrow)}. \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$