



# Modélisation mathématiques des phénomènes de transport en spintronique

EL HAJJ RAYMOND

Laboratoire MIP, Université Paul Sabatier, 31062 Toulouse Cedex 09, France  
elhajj@mip.ups-tlse.fr

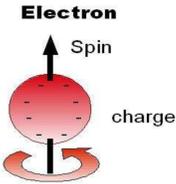


## Introduction

### Définition

• Electron = Charge + Spin

• Spintronique ou "électronique du spin" = nouveau domaine de recherche en plein essor depuis les années 90<sup>'</sup> tentant d'allier l'électronique classique et les propriétés quantiques du spin de l'électron [7]. Il vise à manipuler le spin des porteurs de charge et de l'utiliser comme un nouveau degré de liberté.



### But de notre travail

• Développement et étude théorique et numérique des modèles mathématiques dans ce domaine.

### Ici

• Présentation d'une hiérarchie des modèles mathématiques allant du niveau microscopique au macroscopique.

• Explication de liens entre ces différents modèles.

• Dérivation des modèles macroscopiques qui sont moins coûteux numériquement que les modèles quantiques ou cinétiques et qui restent utiles pour l'étude des courants polarisés en spin.

## Modèle Microscopique

En mécanique quantique, une particule chargée de spin  $\frac{1}{2}$  est caractérisée par une fonction d'onde :  $\Psi = (\psi^{\uparrow}, \psi^{\downarrow})$  solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\partial_t\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + V\right)\Psi + H_{SO}\Psi, \quad (1)$$

•  $H_{SO}$  : hamiltonien de l'interaction spin-orbit.

$$H_{SO} = \Omega(x, k) \cdot \vec{\sigma} \quad (2)$$

$k \equiv -i\hbar\nabla_x$ .

\*  $\vec{\sigma}$  : vecteur des matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

\*  $\Omega$  : champ magnétique effectif autour du quel les spins vont précesser (tourner).

### Exemples :

1. En mécanisme de relaxation d'Elliot-Yafet [7] :

$$H_{SO} = i\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla V \times \nabla) \cdot \vec{\sigma}$$

2. Hamiltonien Spin-Orbit de Rashba [6] :

$$H_R = i\hbar(\sigma_1\partial_{x_2} - \sigma_2\partial_{x_1}).$$

3. Hamiltonien Spin-Orbit de Dresselhauss [1] :

$$H_D = i\hbar(\sigma_{x_1}\partial_{x_1} - \sigma_{x_2}\partial_{x_2}).$$

## Modèle cinétique

• Equation de Boltzmann pour un ensemble des particules de spin  $\frac{1}{2}$  :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + k \cdot \nabla_x F + \nabla_x V \cdot \nabla_k F = Q(F) + i[\Omega(x, k) \cdot \vec{\sigma}, F] + Q_{sf} \quad (4)$$

•  $F(t, x, k) \in \mathcal{H}_2^+(\mathbb{C})$  : ensemble des matrices carrées d'ordre 2 hermitiennes positives .

•  $Q$  : opérateur des collisions.

•  $Q_{sf}$  : opérateur des interactions avec renversement de spin (spin-flip interactions) :

$$Q_{sf}(F) = \frac{\text{tr}(F)I - 2F}{\tau_{sf}}, \quad (5)$$

$\tau_{sf}$  : temps de relaxation du spin.

•  $i[\Omega(x, k) \cdot \vec{\sigma}, F]$  modélise la précession du spin électronique autour du champ effectif  $\Omega(x, k)$  ( $[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$ ).

## Modèle cinétique

Note : Quantique (1)  $\xrightarrow{\hbar \rightarrow 0}$  Cinétique (4)  
(limite semi classique)

$\rightsquigarrow$  Transformation de Wigner [5, 3].

Question : Que représente physiquement la fonction de distribution  $F$  ?

R : Si on décompose  $F$  sous la forme :

$$F = \frac{f_c}{2}I_2 + \vec{f}_s \cdot \vec{\sigma} \quad (6)$$

$\Rightarrow$

\*  $f_c = \text{tr}(F)$  : distribution des charges.

\*  $\vec{f}_s$  : distribution des spins.

$\rightarrow$  Introduisons (6) dans (4)  $\Rightarrow$

$$\frac{\partial f_c}{\partial t} + k \cdot \nabla_x f_c + \nabla_x V \cdot \nabla_k f_c = Q(f_c), \quad (7)$$

$$\frac{\partial \vec{f}_s}{\partial t} + k \cdot \nabla_x \vec{f}_s + \nabla_x V \cdot \nabla_k \vec{f}_s = Q(\vec{f}_s) - 2(\underbrace{\Omega \times \vec{f}_s}_{\text{rotation}}) - \underbrace{2\frac{\vec{f}_s}{\tau_{sf}}}_{\text{relaxation}}. \quad (8)$$

•  $F(t, x, k)$  est une matrice hermitienne  $\Rightarrow$  diagonalisable

$\hookrightarrow$  valeurs propres de  $F$  :

$$f^{\uparrow} = f_c + \|\vec{f}_s\|, \quad f^{\downarrow} = f_c - \|\vec{f}_s\|. \quad (9)$$

$\rightarrow f^{\uparrow}, f^{\downarrow}$  : fonctions de distributions des électrons avec "spin up" et "spin down" respectivement.

## Limite de diffusion

• Réf. : Poupaud [4, 2].

Pour dériver des modèles macroscopiques, nous partons de l'équation cinétique adimensionnée suivante :

$$\frac{\partial F^\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon}(k \cdot \nabla_x F^\varepsilon + \nabla_x V \cdot \nabla_k F^\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon^2}Q(F^\varepsilon) + i\frac{\eta}{\varepsilon}[\Omega(x, k) \cdot \vec{\sigma}, F^\varepsilon] + Q_{sf}(F^\varepsilon). \quad (10)$$

$$F^\varepsilon(0, x, k) = F_{in}(x, k). \quad (11)$$

•  $\eta$  : ordre du couplage spin-orbit.

•  $\varepsilon$  : libre parcours moyen.  $\varepsilon \ll 1$

Q : Suivant l'ordre du couplage spin-orbit  $\eta$ , qu'obtient-on quand  $\varepsilon \rightarrow 0$  ?

• Opérateur de collision :

$$Q(F)(k) = \int_{\mathbb{R}^3} \alpha(k, k')[\mathcal{M}(k)F(k') - \mathcal{M}(k')F(k)]dk', \quad (12)$$

avec  $\mathcal{M}$  est la Maxwellienne :

$$\mathcal{M}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{1}{2}|k|^2}, \quad \forall k \in \mathbb{R}^3.$$

### Hypothèses :

1.  $\alpha(k, k')$  est symétrique et borné.

2.  $V(t, x) \in C^1([0, T], W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3)) \quad \forall T \in \mathbb{R}^+$  et  $V(t, x) \geq 0$ .

### Notations :

$-\mathcal{H}_2^+(\mathbb{C})$  : espace des matrices carrées d'ordre 2 hermitiennes et positives.

$$-\mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2 = \{F = F(k) \in \mathcal{H}_2^+(\mathbb{C}) / \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\|F\|_2^2}{\mathcal{M}} dk < +\infty\}$$

### Propriétés de $Q$ :

1. Conservation de la masse :  $\int_{\mathbb{R}^3} Q(F)dk = 0$ .

2.  $-Q$  est auto-adjoint et positif sur  $\mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2$ .

3.  $\text{Ker}Q = \{F \in \mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2 / \exists N \in \mathcal{M}_2(\mathbb{C}) \text{ t.q. } F(k) = N\mathcal{M}(k)\}$ .

4.  $-Q$  est coercif sur  $(\text{Ker}Q)^\perp$ , et l'on a

$$\text{Im}Q = (\text{Ker}Q)^\perp = \{F \in \mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2 \text{ telle que } \int_{\mathbb{R}^3} F(k)dk = 0\}.$$

**Théorème 1** (Existence et unicité de solution faible). *Pour tout  $\varepsilon > 0$ ,  $T \in \mathbb{R}_+$ ,  $\alpha > 0$  et  $F_{in} \in \mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2(dxdk)$ , l'équation (10)-(11) admet une unique solution faible  $F^\varepsilon \in C^0([0, T]; \mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2(dxdk))$ . En plus, il existe  $C > 0$  indépendante de  $\varepsilon$  tel que :*

$$\|F^\varepsilon\|_{\mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2(dxdk)} \leq C \quad \forall t > 0, \quad \|F^\varepsilon - N^\varepsilon\mathcal{M}\|_{L^2_t(\mathcal{L}_{\mathcal{M}}^2(dxdk))} \leq C\varepsilon^2, \quad (13)$$

avec  $N^\varepsilon = \int_{\mathbb{R}^3} F^\varepsilon(t, x, k)$ .

## Cas $\eta = \mathcal{O}(\varepsilon)$

**Théorème 2.** Soit  $T > 0$  supposons que les hypothèses (1)-(2) sont vérifiées et que  $\eta = \mathcal{O}(\varepsilon)$ . Soit  $F^\varepsilon$  la solution faible de (10)-(11) alors  $N^\varepsilon := \int_{\mathbb{R}^3} F^\varepsilon dk$  converge faiblement vers  $N \in L^2([0, T] \times \mathbb{R}^3; \mathcal{H}_2^+(\mathbb{C}))$  et si on décompose la matrice densité  $N$  sous la forme :  $N = \frac{N_c}{2}I_2 + \vec{N}_s \cdot \vec{\sigma}$  alors la densité de charge  $N_c$  et la densité de spin  $\vec{N}_s$  vérifient

$$\begin{cases} \partial_t N_c - \text{div}_x(\mathbb{D}_1(\nabla_x N_c - \nabla_x V N_c)) = 0 \\ \partial_t \vec{N}_s - \text{div}_x(\mathbb{D}_1(\nabla_x \vec{N}_s - \nabla_x V \vec{N}_s)) = -2H_e \times \vec{N}_s - 2\frac{\vec{N}_s}{\tau_{sf}}, \\ N(0, x) = \int_{\mathbb{R}^3} F_{in}(x, k)dk \end{cases} \quad (14)$$

avec  $\mathbb{D}_1$  est une matrice symétrique définie positive donnée par (19) et

$$H_e = \int_{\mathbb{R}^3} \Omega(x, k)\mathcal{M}(k)dk \quad (15)$$

Problème : Si  $\Omega$  est impaire %  $k$  (cas spin-orbit de Rashba ou Dresselhauss)  $\Rightarrow H_e = 0 \Rightarrow$  pas de traces d'effets spin-orbit dans les équations limites (14).

Solution : Se mettre dans un échelle de diffusion t.q  $\eta = \mathcal{O}(1)$ .

## Cas $\eta = \mathcal{O}(1)$

•  $\eta = 1$  dans la suite.

### Hypothèses 3.

$\Omega(x, k)$  est impair par rapport à  $k$  et  $\exists C_0 > 0$  et  $m \in \mathbb{N}$  tels que

$$|\Omega(k)| + |\nabla_k \Omega(k)| \leq C_0(1 + |k|)^m. \quad (16)$$

**Proposition 1.** Il existe une unique  $\theta_1 \in (L^2_{\mathcal{M}})^3$  et  $\theta_2 \in (L^2_{\mathcal{M}})^3$  tel que

$$-Q(\theta_1 I_2) = k\mathcal{M}(k)I_2, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \theta_1(k)dk = 0, \quad (17)$$

$$-Q(\theta_2 I_2) = \Omega(x, k)\mathcal{M}(k)I_2, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \theta_2(k)dk = 0, \quad (18)$$

**Proposition 2.** Soient  $\mathbb{D}_1, \mathbb{D}_2, \mathbb{D}_3$  et  $\mathbb{D}_4$  les matrices définies respectivement par

$$\begin{aligned} \mathbb{D}_1 &= \int_{\mathbb{R}^3} (\theta_1(k) \otimes k)dk, & \mathbb{D}_2 &= \int_{\mathbb{R}^3} (k \otimes \theta_2(k))dk, \\ \mathbb{D}_3 &= \int_{\mathbb{R}^3} (\Omega(k) \otimes \theta_1(k))dk(\mathbb{R}), & \mathbb{D}_4 &= \int_{\mathbb{R}^3} (\theta_2(k) \otimes \Omega(k))dk \end{aligned} \quad (19)$$

alors  $\mathbb{D}_1$  et  $\mathbb{D}_4$  sont symétriques définies positives et  ${}^t\mathbb{D}_3 = \mathbb{D}_2$ .

**Théorème 3.** Supposons que  $\eta = \mathcal{O}(1)$  et que les hypothèses (1)-(2) et (3) sont vérifiées. Alors  $N^\varepsilon := \int_{\mathbb{R}^3} F^\varepsilon dk$  converge faiblement vers  $N$  dans  $L^2([0, T] \times \mathbb{R}^3; \mathcal{H}_2^+(\mathbb{C}))$  et si on pose  $N = \frac{N_c}{2}I_2 + \vec{N}_s \cdot \vec{\sigma}$  alors  $N_c$  et  $N_s$  vérifient :

$$\partial_t N_c - \text{div}_x(\mathbb{D}_1(\nabla_x N_c - \nabla_x V N_c)) = 0$$

$$\begin{aligned} \partial_t \vec{N}_s - \text{div}_x\{\mathbb{D}_1(\nabla_x \vec{N}_s - \nabla_x V \vec{N}_s) + 4(\mathbb{D}_2^k \times \vec{N}_s)_k\} \\ = -2(\mathbb{D}_3(\nabla_x V) + \text{div}_x \mathbb{D}_2) \times \vec{N}_s + 4(\mathbb{D}_4 - \text{tr} \mathbb{D}_4)\vec{N}_s - 2\frac{\vec{N}_s}{\tau_{sf}}. \end{aligned}$$

où  $\mathbb{D}_2^k$  est la  $k^{\text{ème}}$  ligne de  $\mathbb{D}_2$  et  $\text{div}_x \mathbb{D}_2 = \sum_k \partial_{x_k} \mathbb{D}_2^k$ .

## Conclusion et perspectives

• Nous avons étudié la limite de diffusion de la "spinor" forme de l'équation de Boltzmann pour différent ordre du couplage spin-orbit.

• Les modèles macroscopiques que nous avons dérivés sont moins coûteux numériquement que les modèles cinétiques et ils gardent des effets microscopiques de précession et de diffusion du spin électronique.

### Perspectives

• Application numérique : simulation des transistor à rotation de spin ou Spin-FET (Spin Field Effect Transistor) (travail en cours)

• Couplage avec la magnétisation locale (Landau-Lifshitz equation) dans les matériaux ferromagnétiques.

### Références

- [1] G. Dresselhauss, Spin-Orbit Coupling Effect in Zinc Blende Structures, Phys. Rev., 100 (1955), 580.
- [2] F. Golsse, F. Poupaud, Limite fluide des équations de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac, 6 (1992), 135-160.
- [3] P.-L. Lions, T. Paul, Sur les mesures de Wigner, Rev. Mat. Iberoamericana, 9 (1993), 553-618.
- [4] F. Poupaud, Diffusion approximation of the linear semi-conductor Boltzmann equations, Asympt. Anal. 4 (1991), 293-317.
- [5] E. Wigner, On the quantum correction for the thermodynamic equilibrium, Phys. Rev. 40 (1932), 749-759.
- [6] Yu. A. Bychkov, E. I. Rashba, Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers, J. Phys. C : Solid State Phys., 17 (1984), 6039.
- [7] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, Spintronics : Fundamentals and applications, Cond-Mat. 0405528, V1 (May 2004).