Modélisation mathématique des phénomènes de transport en Spintronique

Raymond EL HAJJ, Laboratoire MIP, Université Paul Sabatier Toulouse 3

La spintronique, ou "l'électronique du spin", est un nouveau domaine de recherche tentant d'allier l'électronique classique et les propriétés quantiques du spin de l'électron. Il vise à manipuler le spin des porteurs de charge et de l'utiliser comme un nouveau degré de liberté.

Dans des composantes à base de semi-conducteur, des effets de couplage spin-orbit (Rashba, Dresselhauss selon l'origine physique [1], [2]) agissent sur l'orientation du spin électronique. Ces couplages créent des "champs magnétiques effectifs" autour des quels les électrons vont précesser. Nous partons d'un modèle cinétique de type Boltzmann adimensionné de la forme

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

La fonction de distribution, $F^\varepsilon = F^\varepsilon(t,x,k)$, est une fonction à valeur dans l'ensemble des matrices carrées d'ordre deux, hermitiennes et positives. L'opérateur Q est l'opérateur de collision. Les effets de précession du spin autour d'un certain champ magnétique effectif $\Omega(x,k)$ sont pris en compte par le terme $i\alpha[\Omega(x,k).\vec{\sigma}, F]$ où $\vec{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli. L'ordre du couplage spin-orbit est donné par α. Le dernier terme de l'équation précédente, Q_{sf}, représente les interactions avec renversement du spin (spin-flip interactions). Cet opérateur est donné par une expression de la forme:

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

τ_{sf} est le temps de relaxation du spin. Le paramètre $\varepsilon > 0$ est le libre parcours moyen. Selon l'ordre de α par rapport à ε, nous nous intéresserons à la dérivation des modèles macroscopiques par des méthodes asymptotiques en faisant tendre ε vers zéro dans (1). *Dans le cas où* $\alpha = \mathcal{O}(\varepsilon)$ et si on considère des collisions électron-phonon, nous montrerons qu'à la limite, les effets de précession du spin disparaîssent. Notamment, $F^\varepsilon(t,x,k) \to \rho(t,x)M(k)$, où M est la maxwellienne. En plus, si l'on décompose la matrice densité ρ sous la forme: $\rho = \rho_c I_2 + \vec{\rho}_s.\vec{\sigma}$, alors la densité de charge ρ_c et la densité de spin $\vec{\rho}_s$ vérifient:

$$\partial_t \rho_c - div(\mathbb{D}(\nabla_x \rho_c + \nabla_x V \rho_c)) = 0$$

$$\partial_t \vec{\rho}_s - div(\mathbb{D}(\nabla_x \vec{\rho}_s + \nabla_x V \vec{\rho}_s)) = -2H_e \times \vec{\rho} - \frac{\vec{\rho}_s}{\tau_{sf}},$$

où $\mathbb{D}$ est une matrice carrée d'ordre 3 symètrique définie positive et $H_e = \int_k \Omega(k)M(k)dk$. En pratique (effet de Rashba et Dresselhauss), Ω est un vecteur impaire par rapport au vecteur d'onde k, ce qui annule le champ magnétique effectif H_e. Un autre modèle macroscopique de type Dérive-Diffusion (dans le cas $\alpha = \mathcal{O}(1)$) conservant des effets de rotation et de relaxation du spin électronique sera présenté. Nous parlerons finalement, des modèles macroscopiques intermédiaires qu'on appelle modèles SHE (Spherical Harmonic Expansion model).

Références

[1] Yu. A. Bychkov, E. I. Rashba, *Oxillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers*, J. Phys. C: Solid State Phys., 17, 6039, 1984.

[2] G. Dresselhauss, *Spin-Orbit Coupling Effect in Zinc Blende Structures*, Phys. Rev., 100, 580, 1955.

[3] Y. Qi, S. Zhang, *Spin diffusion at finite electric and magnetic fields*, Phys. Rev. B, 67, 052407 (2003).

[4] Z.G. Yu, M. E. Flatté, *Spin diffusion and injection in semiconductor structures: Electric field effects*, Phys. Rev. B, 66, 235302 (2002).

Raymond EL HAJJ – `elhajj@mip.ups-tlse.fr`

Laboratoire des Mathématiques pour l'Industrie et la Physique, Université Paul Sabatier, 31062 Toulouse Cedex 09, France.