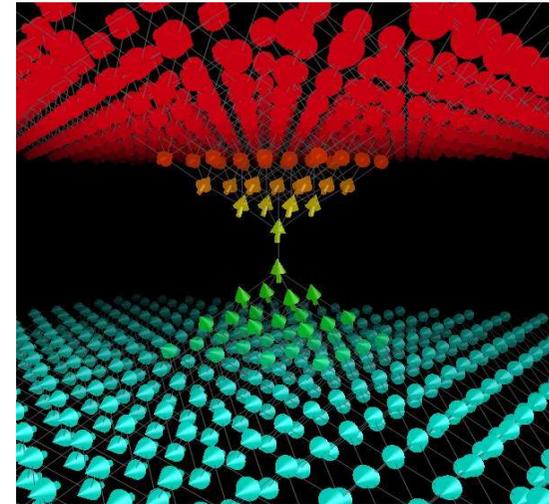


Nano-transport électronique

Etude théorique du transport électronique à travers des contacts atomiques de fer



Cyrille Barreteau¹
Gabriel Autès¹ (thèse)
Marie-Catherine Desjonquères¹
Daniel Spanjaard²
Michel Viret³

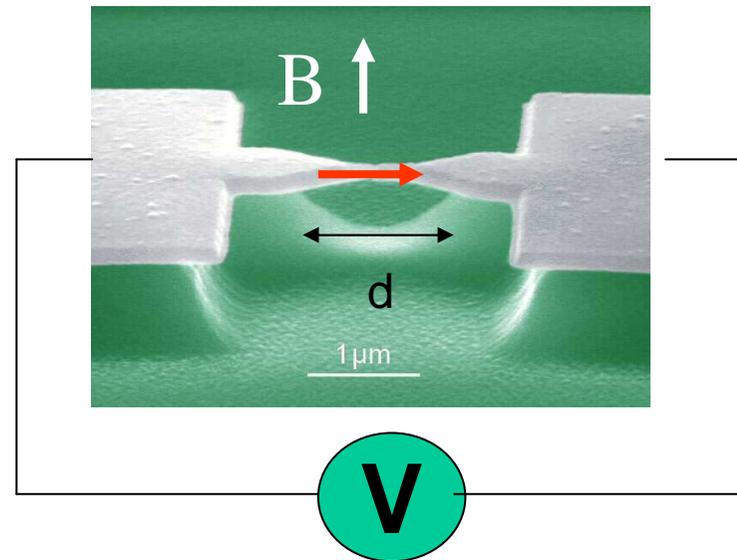


- 1 Service de Physique et Chimie des Surfaces et Interfaces (SPSCI)
2 Laboratoire de Physique des Solides (LPS), Orsay
3 Service de Physique de l'Etat Condensé (SPEC)

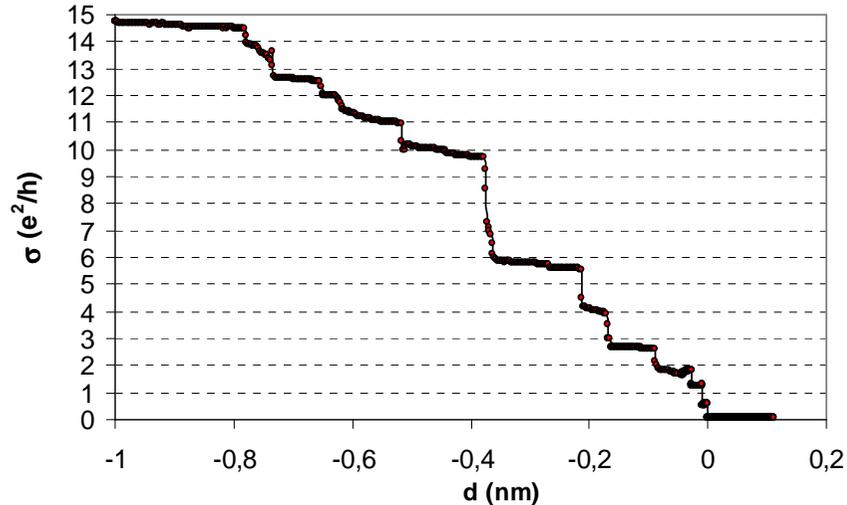
Introduction

Motivation

Expérience de transport électronique dans des **jonctions à cassures** magnétiques (Fe,Co,Ni).



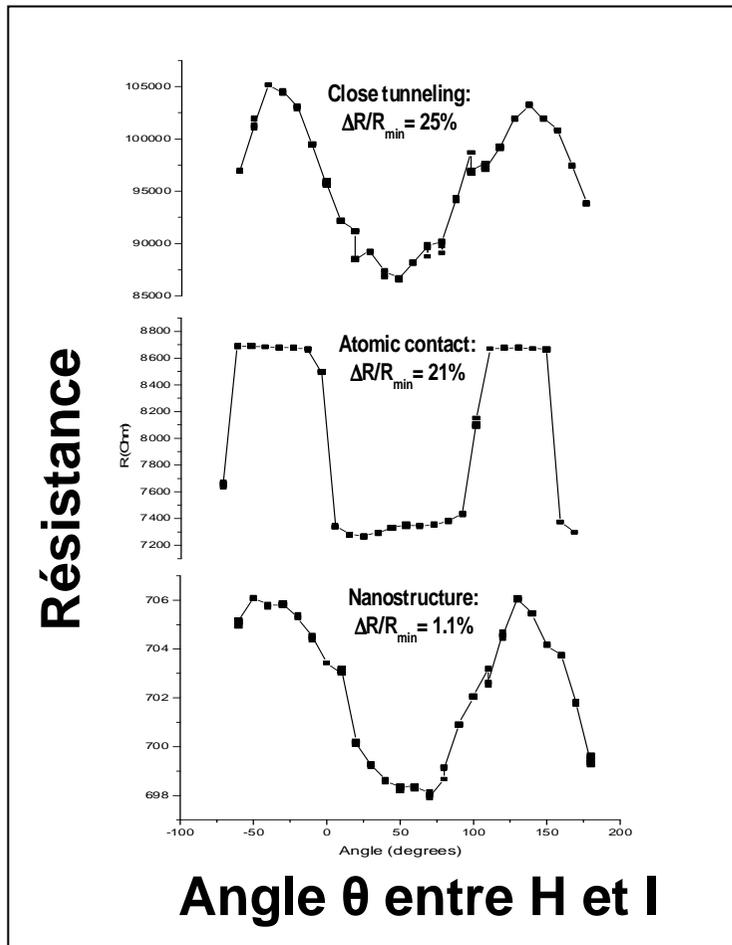
Courbe conductance= $\sigma(d)$



Plateaux de conduction
(quantification de la conductance)

$$\frac{e^2}{h}$$

Introduction



Magnétorésistance anisotrope

$$\sigma = \sigma(\vec{B})$$

$$B \sim 2T$$

$$E_{Zeeman} = -\mu_B \vec{M} \cdot \vec{B}$$

$$B \sim 2T, M \sim 2\mu_B$$

$$E_{Zeeman} \sim qq_s 10^{-4} eV$$

$$E_{ani} \sim 10^{-5} eV \text{ (en volume)}$$

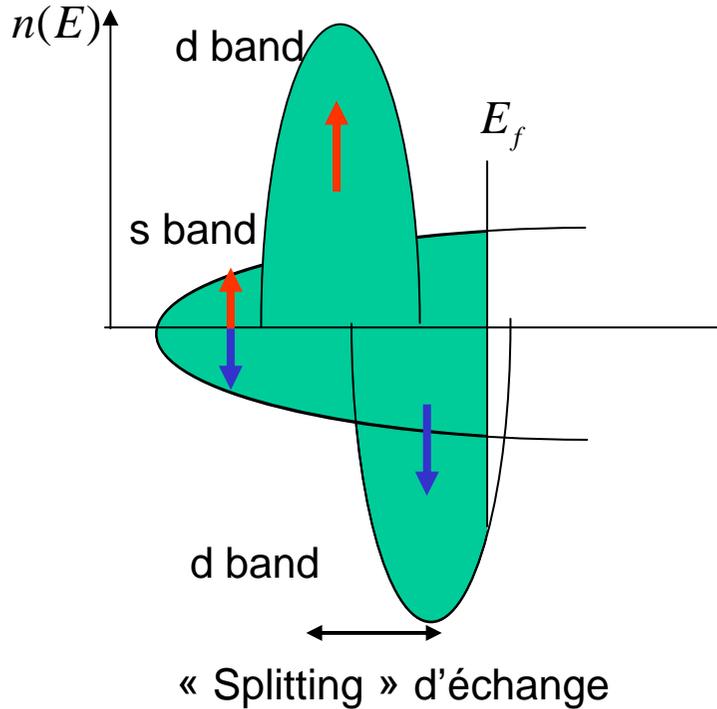
M. Viret & al., Euro Phys B 51, 1 (2006)

Introduction

Quelques principes de base du transport électronique dans un matériau magnétique



asymétrie entre spin up et spin down



Modèle de Mott

Le courant est dû aux électrons s

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad m_s < m_d$$

Peu de « spin-flip »

$$l_{pm} \sim 10nm \quad \ll \quad l_{spin} \sim 100nm$$

$$\downarrow \quad \rho^\pm = \rho_{ss}^\pm + \rho_{sd}^\pm$$

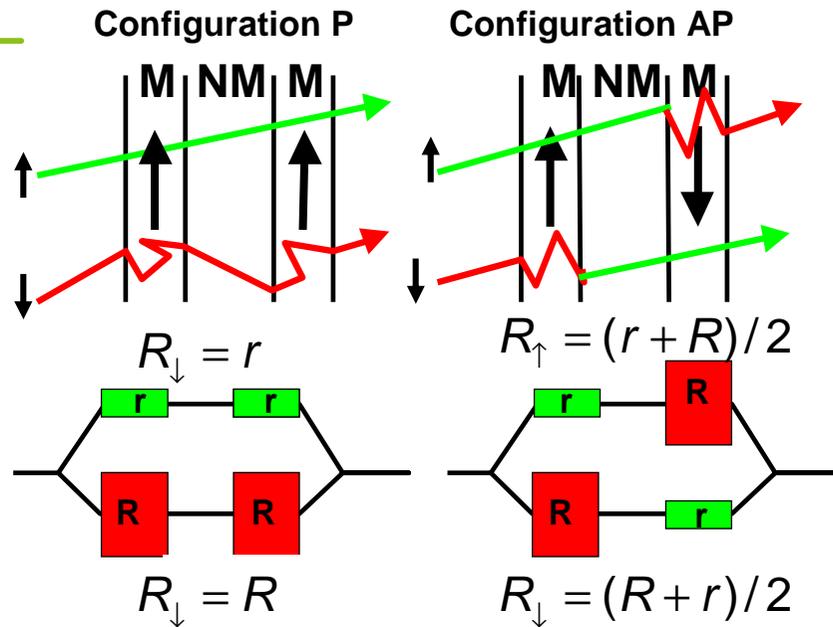
Modèle à deux canaux en //

$$\sigma^\pm = \frac{n_s e^2 \tau_s^\pm}{m_s^*} \quad \rho_\downarrow > \rho_\uparrow$$

$$\rho = \frac{\rho_\uparrow \rho_\downarrow}{\rho_\uparrow + \rho_\downarrow}$$

Introduction

Les bases de l'électronique de spin « classique »



$$R_P = \frac{Rr}{R+r} \approx r < R_{AP} = \frac{R+r}{4}$$

$$\text{GMR} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}$$

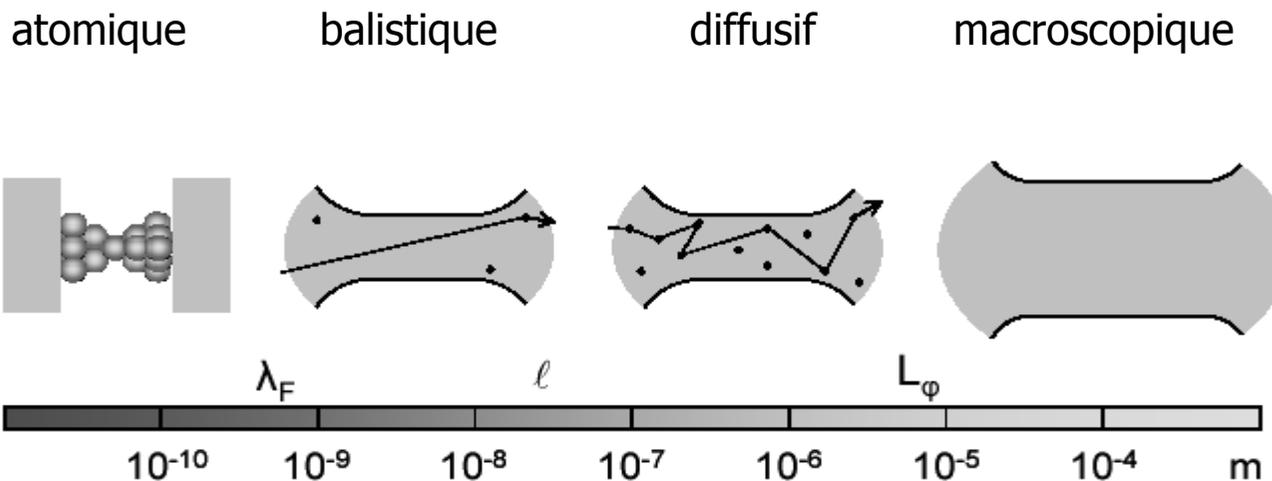
Introduction

l'électronique de spin balistique et atomique

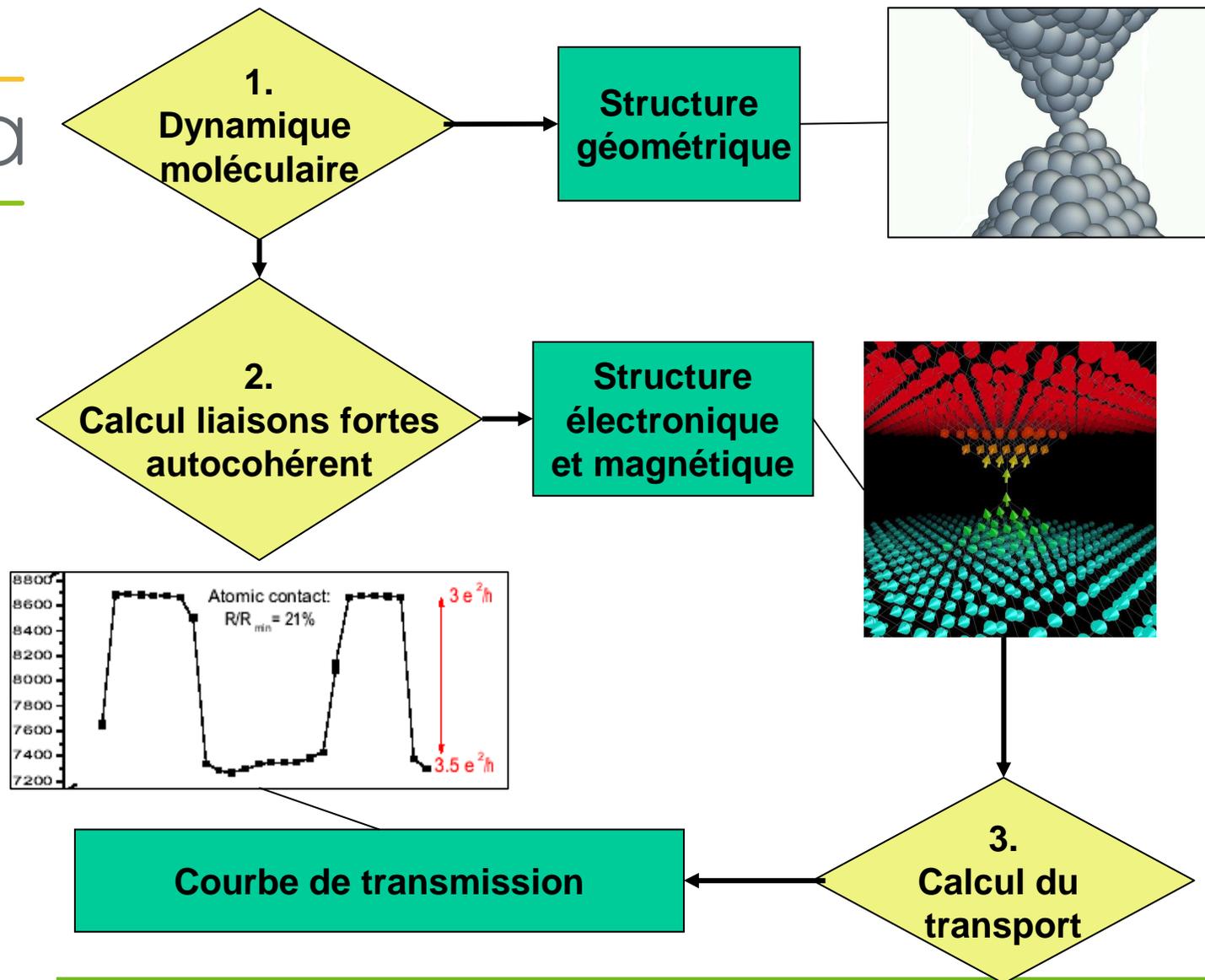


Loi d'Ohm:
 $I = G V$
 $G = \sigma S / L$

- Si $L \gg$
- λ_F longueur d'onde de Fermi (quantique)
 - ℓ_{pm} libre parcours moyen (élastique)
 - L_ϕ longueur de cohérence (inélastique)

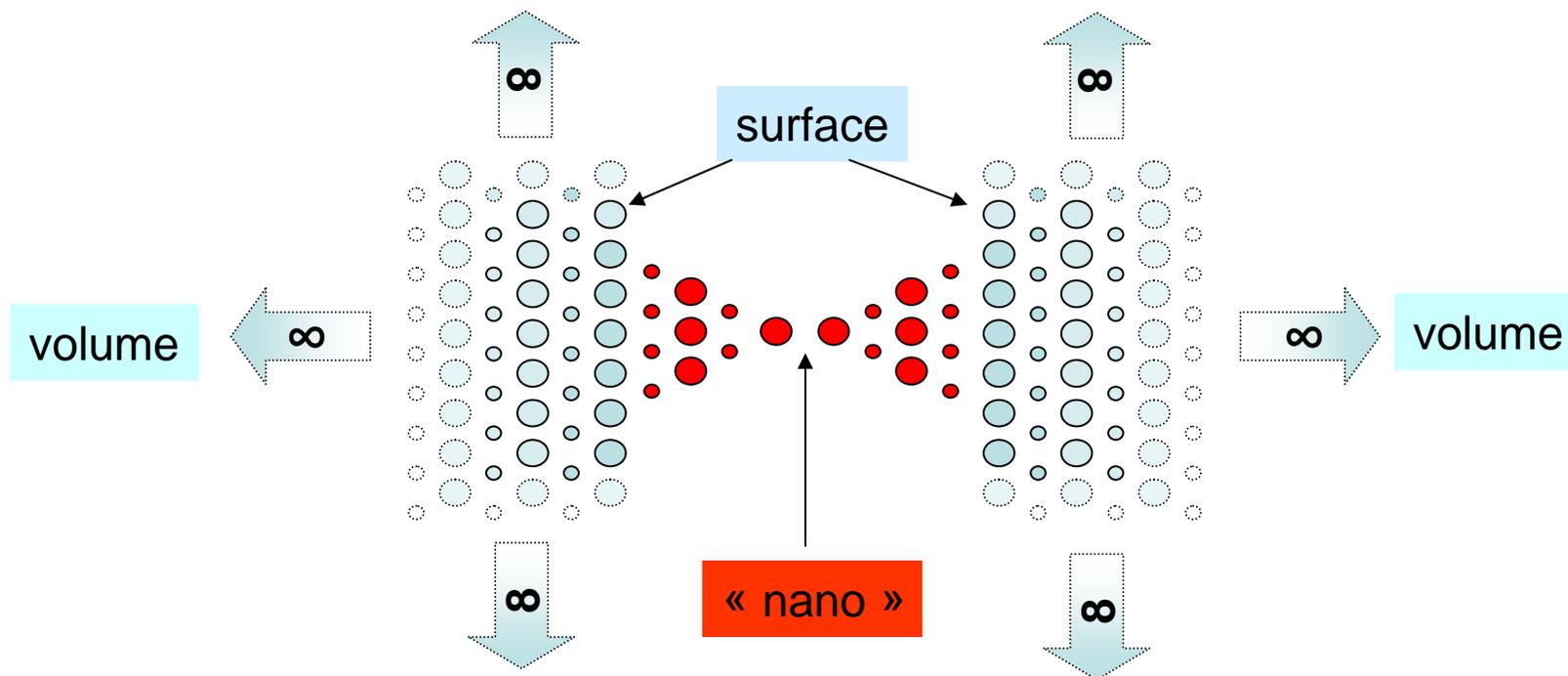
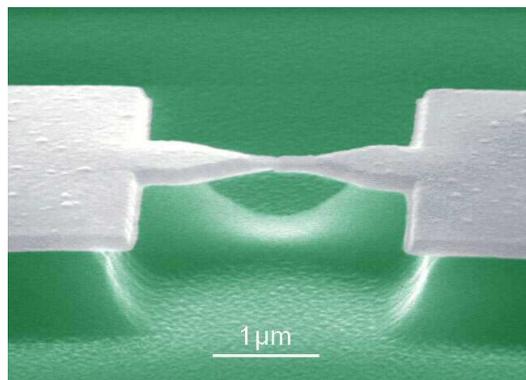


Modélisation: démarche



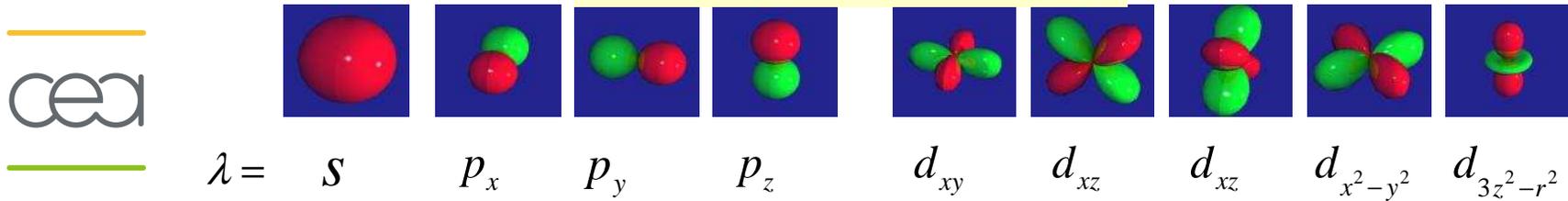
Modélisation atomique

cea

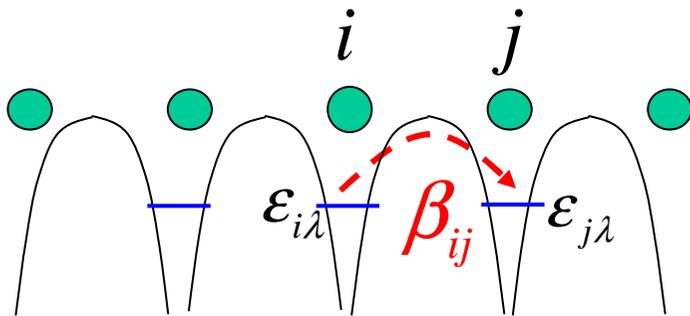


Structure électronique: liaisons fortes

$$H_0 = \sum_{ij\lambda\mu} |i\lambda\rangle \langle i\lambda| H |j\mu\rangle \langle j\mu|$$

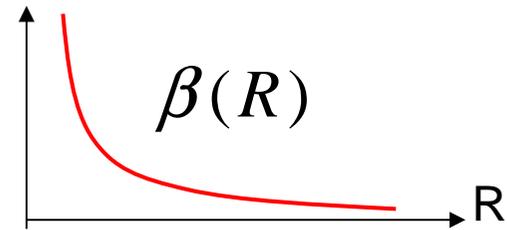


i =atome
 λ =orbitale



Intégrale de saut

$$\beta_{ij}^{\lambda\mu} = \langle i\lambda | H | j\mu \rangle$$



Niveau électronique de l'orbitale $i\lambda$

$$\epsilon_{i\lambda} = \langle i\lambda | H | i\lambda \rangle$$



paramètres à déterminer (ajustement sur calculs ab-initio)

Structure électronique: magnétisme

$$H = H_0 + H_{\text{int}}$$

$$H_{\text{int}}$$

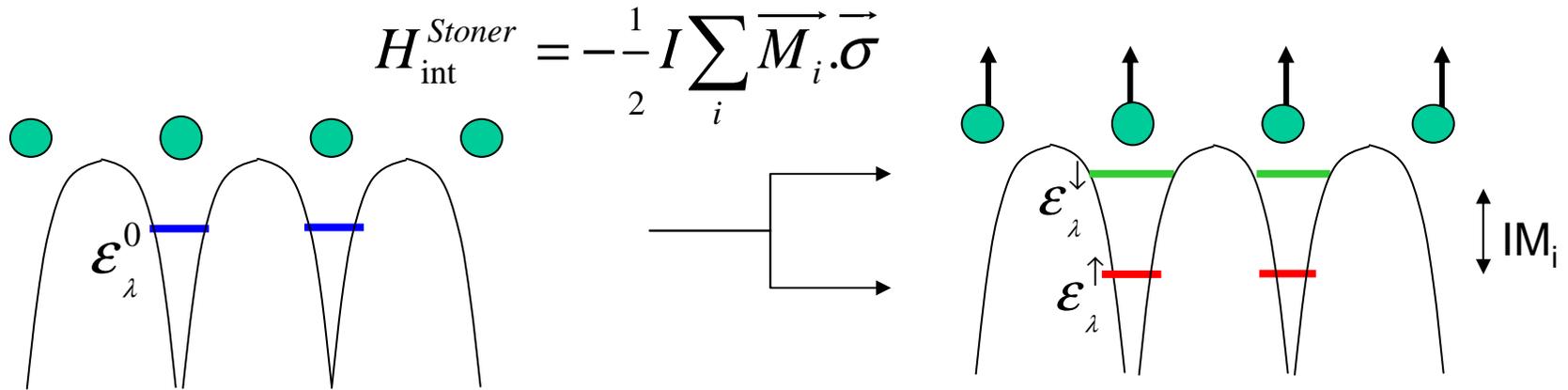
Interaction électron-électron
intra-atomique

- Hartree-Fock (HF) « complet »

$$H_{\text{int}}^{\text{HF}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\lambda\mu\nu\eta \\ \sigma\sigma'}} \left(U_{i\lambda\mu\nu} \langle c_{i\eta\sigma}^+ c_{i\nu\sigma} \rangle c_{i\mu\sigma}^+ c_{i\lambda\sigma} - U_{\eta\mu\lambda\nu} \langle c_{i\eta\sigma}^+ c_{i\nu\sigma} \rangle c_{i\mu\sigma}^+ c_{i\lambda\sigma} \right)$$

$$U_{i\lambda\mu\nu} = \langle \varphi_{i\lambda\sigma}(\vec{r}) \varphi_{i\mu\sigma'}(\vec{r}') \left| \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right| \varphi_{i\nu\sigma}(\vec{r}) \varphi_{i\eta\sigma'}(\vec{r}') \rangle$$

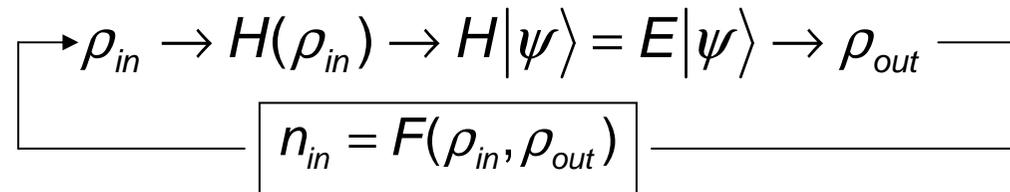
- Modèle de Stoner



Problème auto-cohérent

Eur. Phys. J B 55, 23 (2007).

Phys. Rev. B 76, 024412 (2007).



Structure électronique: magnétisme (paramètres)

Les paramètres d'interaction



• Hartree-Fock

$U_{\lambda\mu\nu\eta}$ = Fonction linéaire(A, B, C)

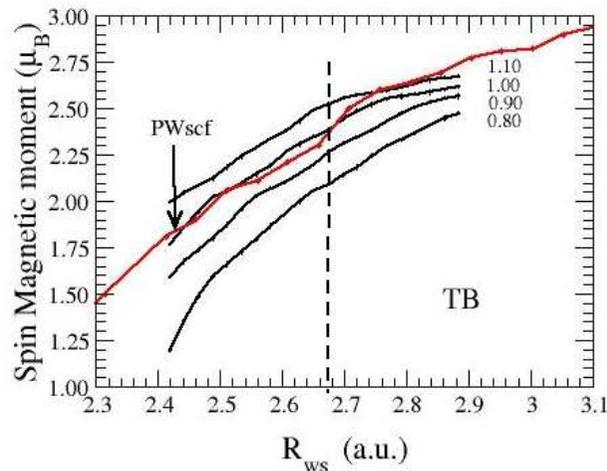
A, B, C : paramètres de Racah \Rightarrow **U, J, B**

$B / J \sim 0.14$

• Stoner

$$I = \frac{U + 6J}{5}$$

I : paramètre de Stoner



Fer

$I \sim 1\text{eV}$ → Moment de spin

$U \sim J \sim 0.7\text{eV}$

$B \sim 0.1\text{eV}$ → Moment orbital

$[\xi \sim 60\text{meV}]$

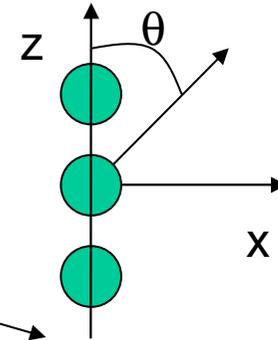
J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) 6785-6813.

Structure électronique: couplage spin-orbite

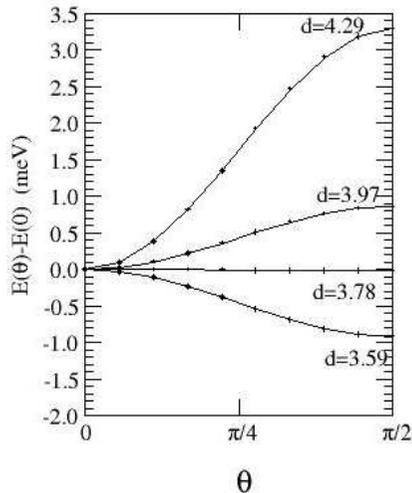
$$H_{SO} = \sum_i \xi_i \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i$$



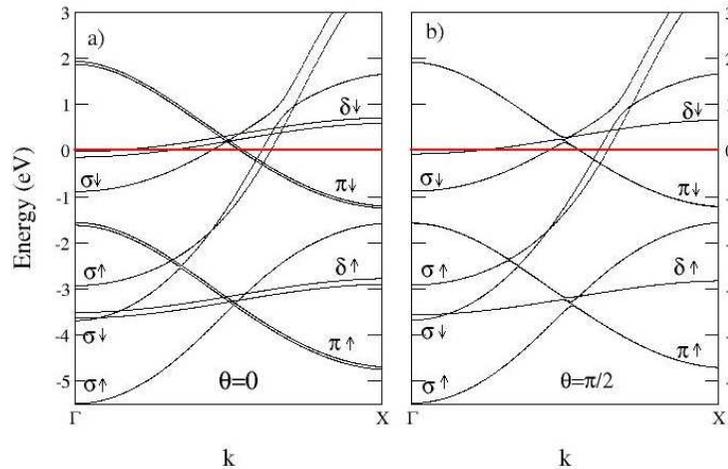
Implications du couplage spin-orbite



Anisotropie magnétique



Anisotropie de la structure de bandes



Moment orbital

$$M_L \sim 0.1 \mu_B \text{ (volume)}$$

$$M_L \sim 0.5 - 1 \mu_B \text{ (fil)}$$

(selon le modèle)

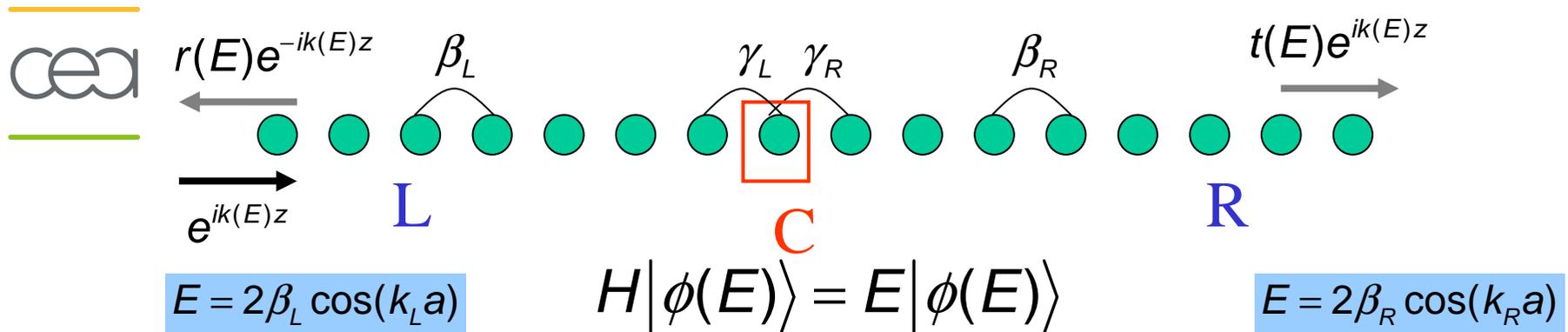
J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006) 6785-6813.

Effets amplifiés par le modèle HF en basse dimension

(polarisation orbitale)

Transport électronique (intro)

diffusion cohérente



$$I = \frac{e}{h} \int (f(E - \mu_R) - f(E - \mu_L)) T(E) dE$$

$$T(E) = t(E) \frac{v_{kR}}{v_{kL}}$$

$$\mu_R - \mu_L = eV$$

\longrightarrow
V petit

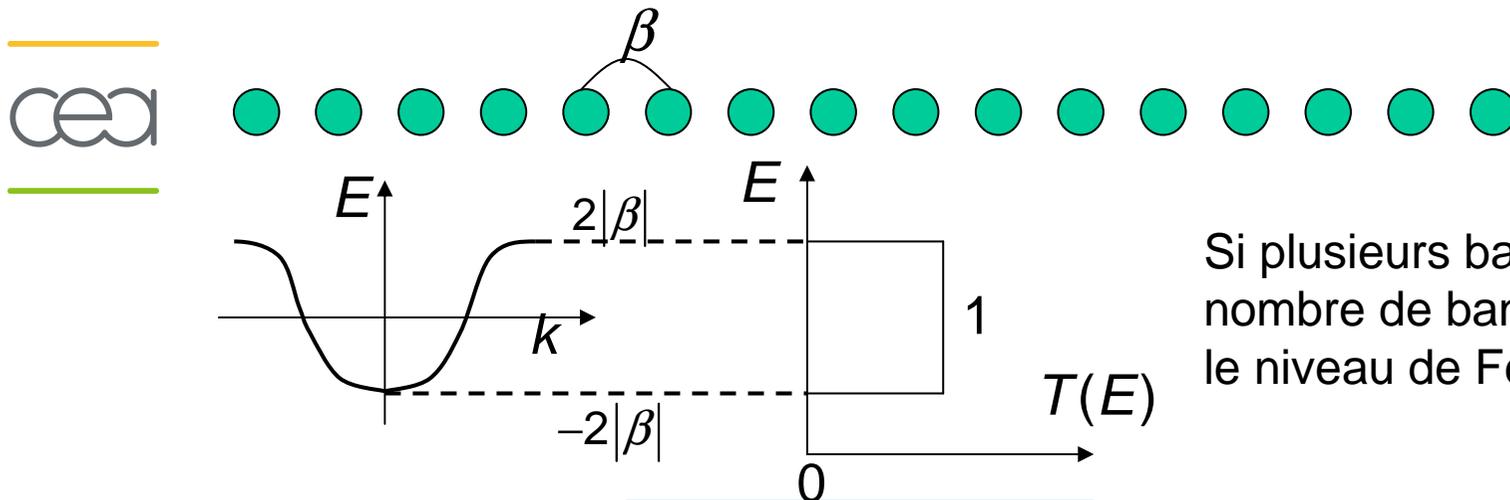
$$I = \frac{e^2}{h} T(E_f) V$$

$$\sigma = \frac{e^2}{h} T(E_f)$$

Quantum de conductance $\frac{e^2}{h}$

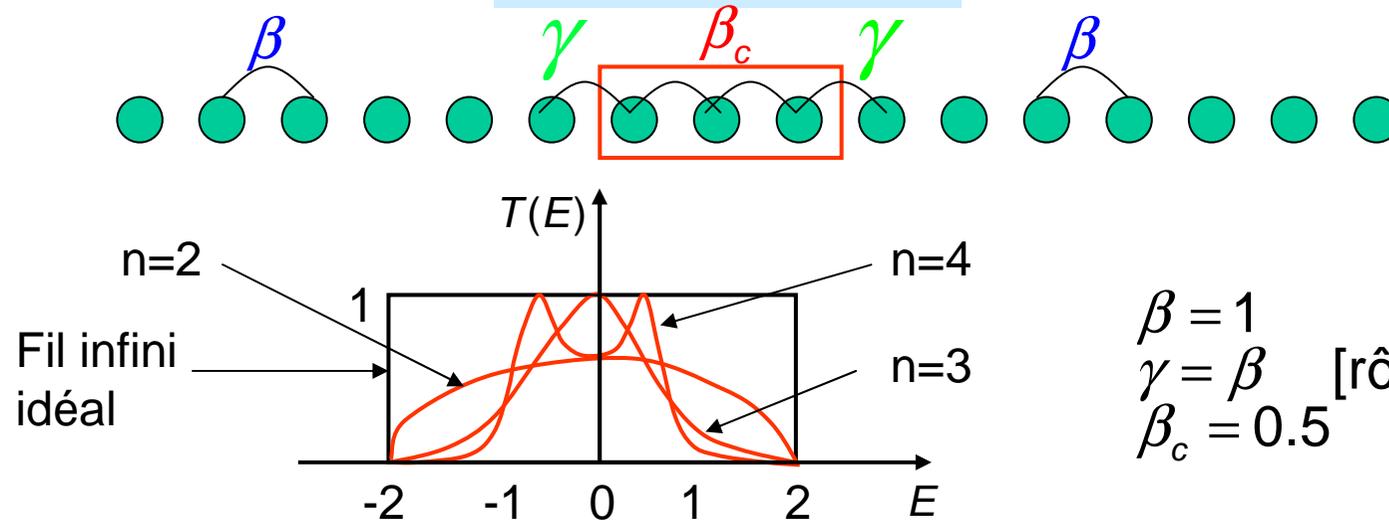
Transport électronique (intro)

Fil infini idéal: transmission parfaite



Si plusieurs bandes:
nombre de bandes coupant
le niveau de Fermi ($k > 0$)

Fil avec un défaut

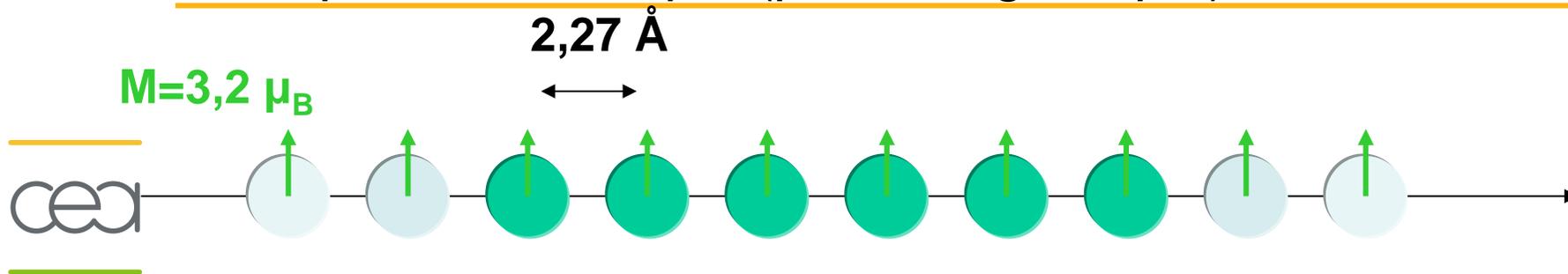


$$\beta = 1$$

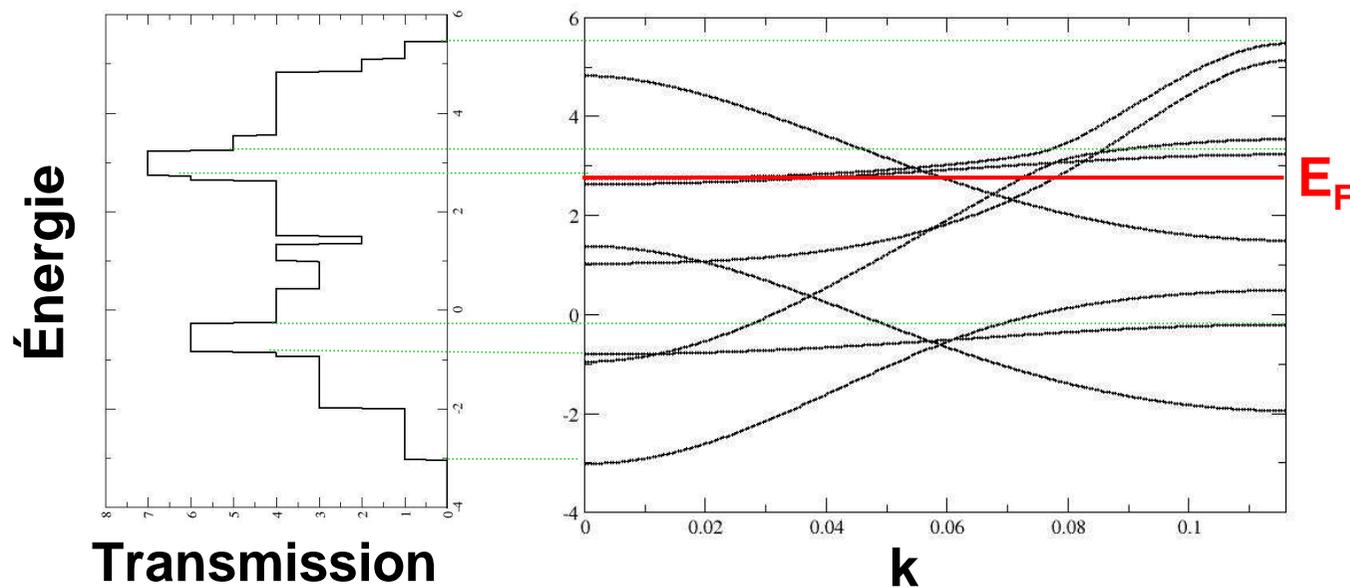
$$\gamma = \beta \quad [\text{rôle important}]$$

$$\beta_c = 0.5$$

Transport électronique (paroi magnétique)

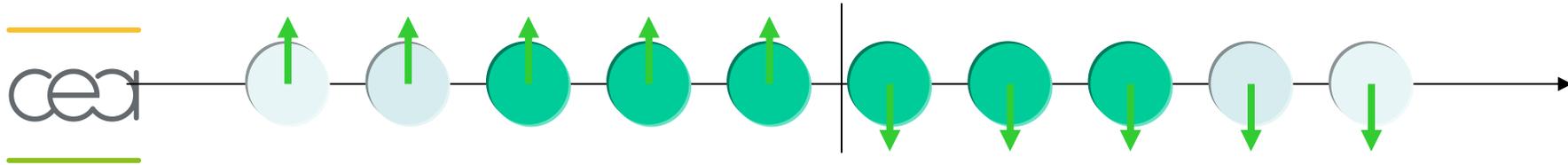


Structure de bandes

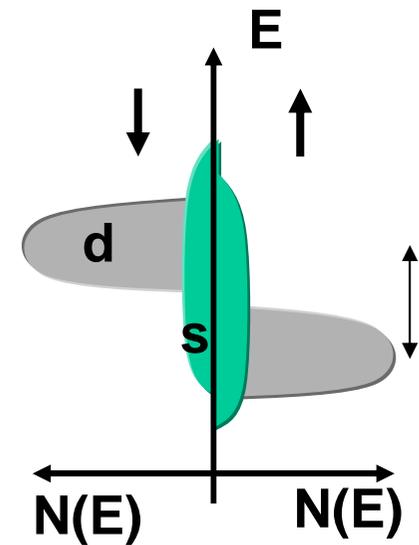
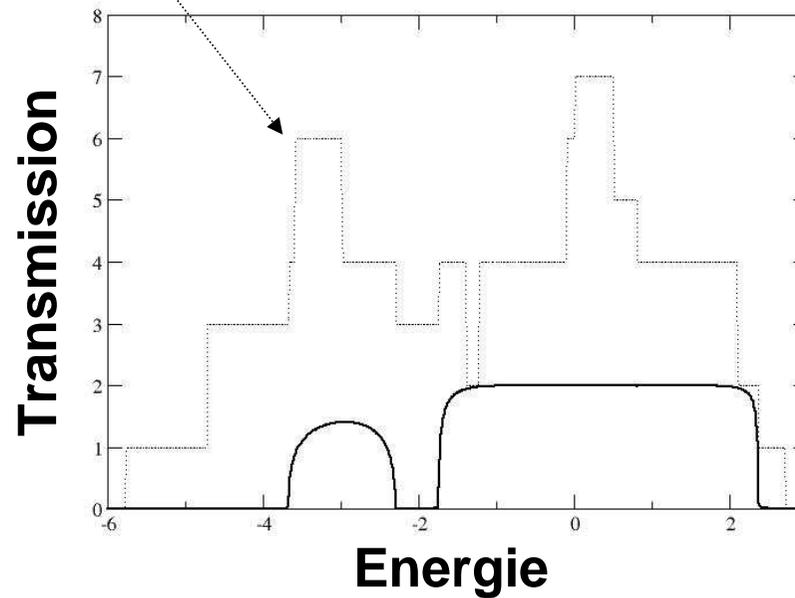


Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique

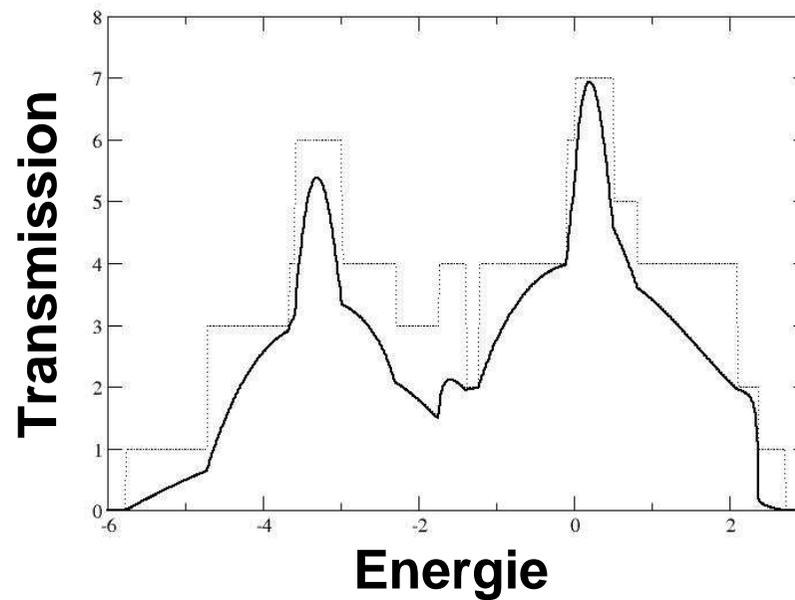
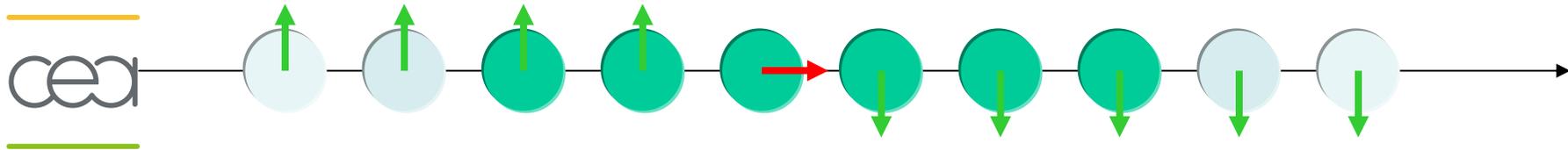


Transmission du fil sans défaut



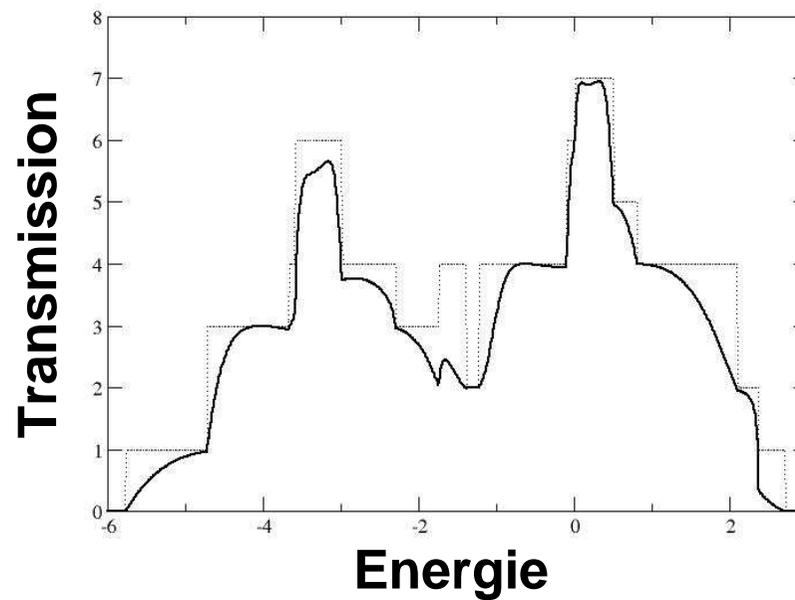
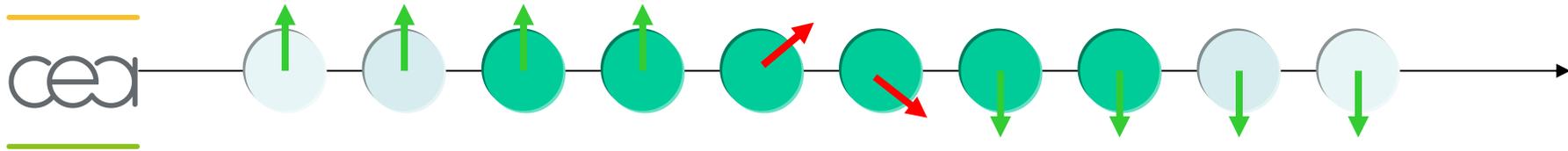
Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



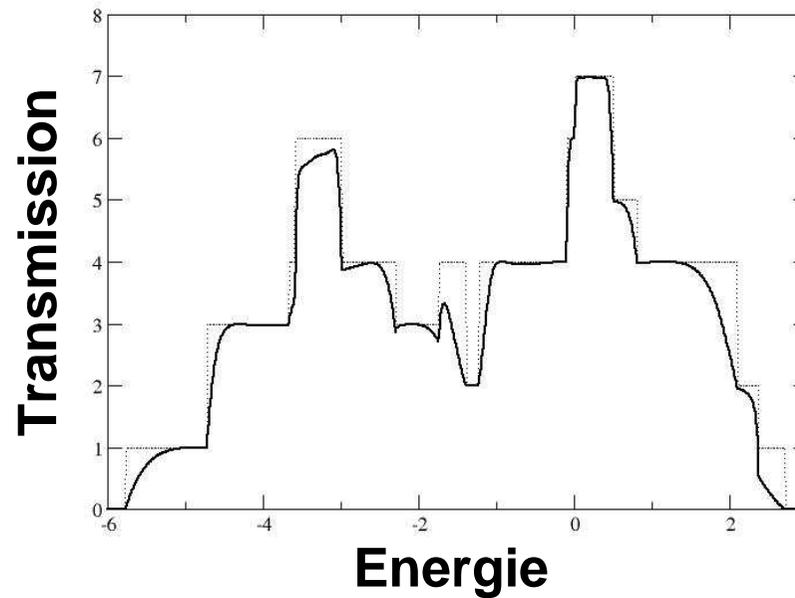
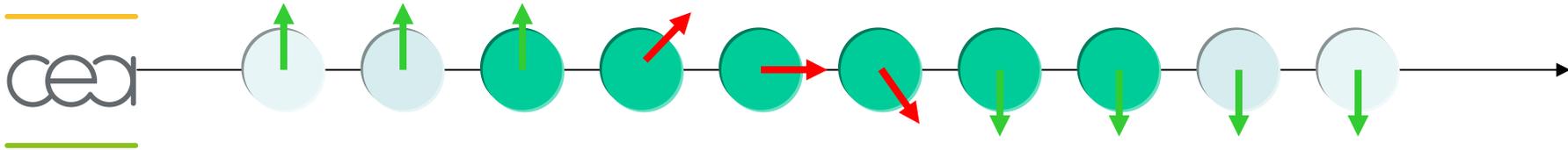
Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



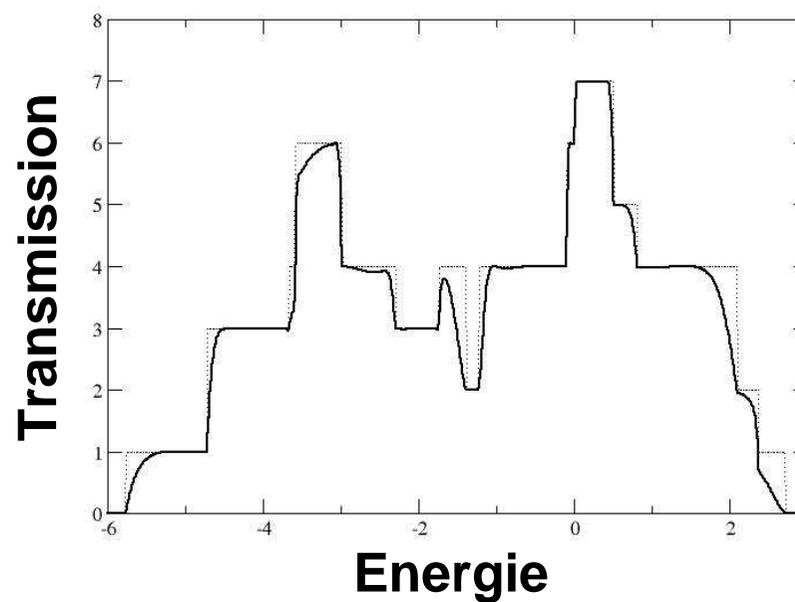
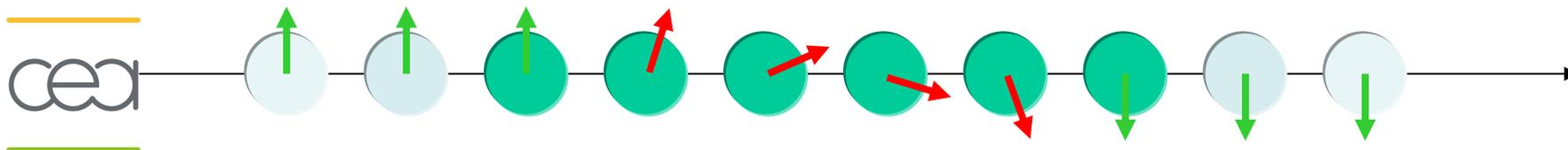
Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



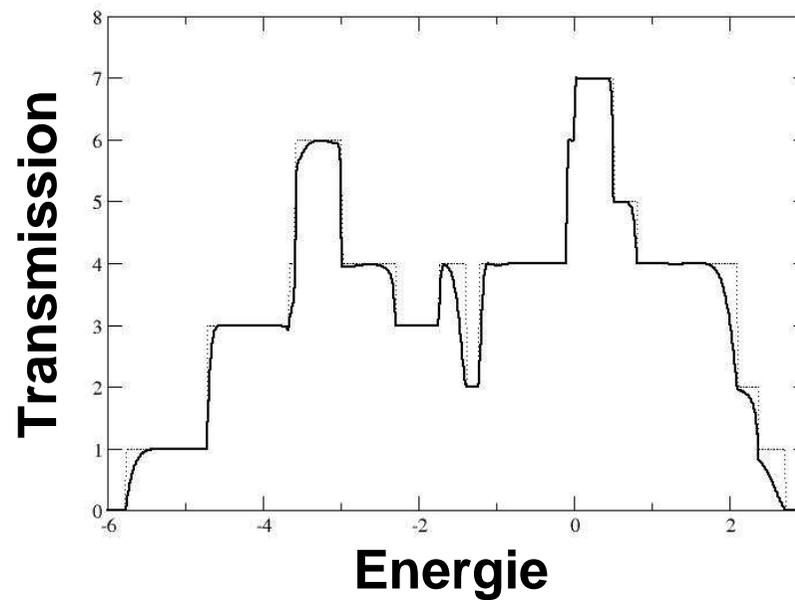
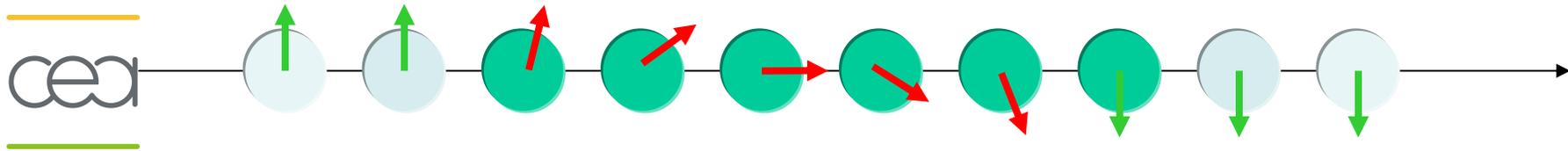
Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



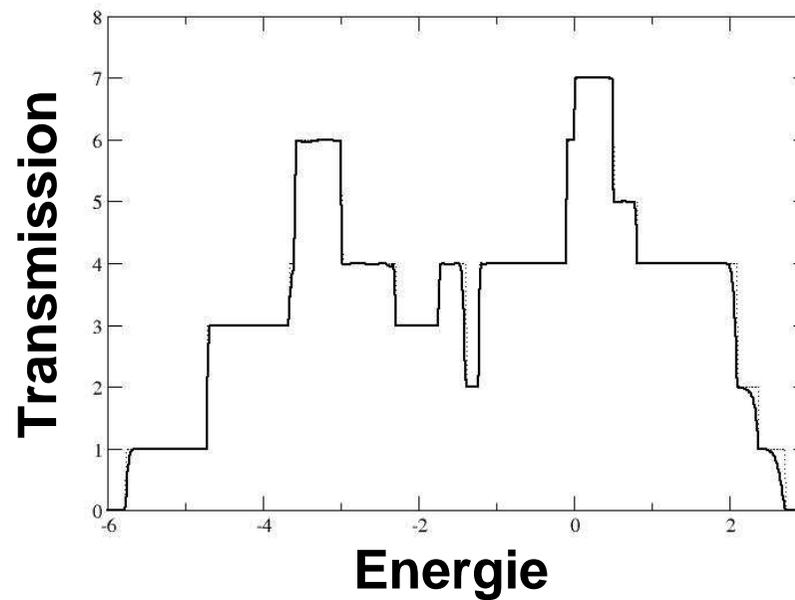
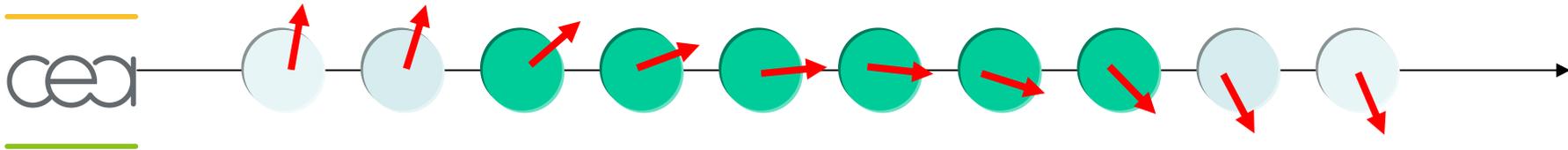
Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



Transport électronique (paroi magnétique)

- Défaut magnétique



Transport électronique (paroi magnétique)



Conclusion: Faible magnéto-résistance de paroi



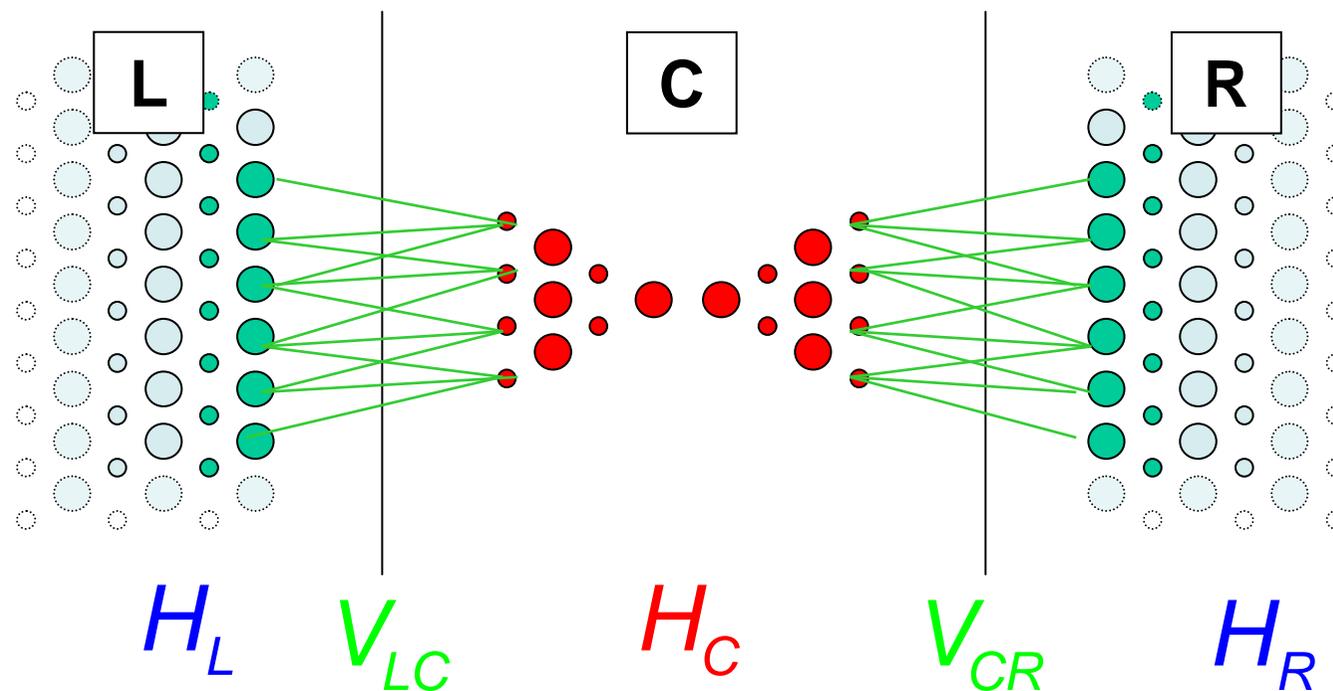
Impossibilité de construire des « devices » sur ce principe

SAUF SI

Paroi très étroite

(dans une constriction)

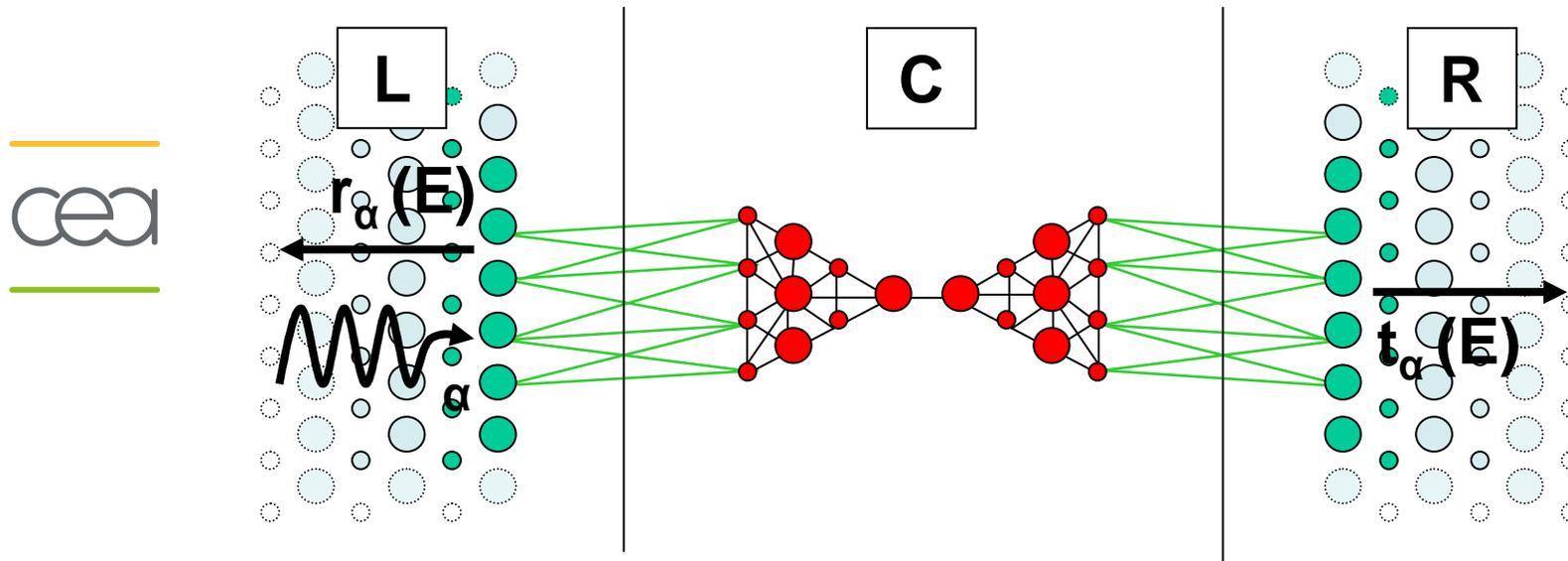
Transport électronique (modélisation du système réel)



$$H = \begin{pmatrix} H_L & V_{LC}^t & 0 \\ V_{LC} & H_C & V_{CR} \\ 0 & V_{CR}^t & H_R \end{pmatrix}$$

∞
 $N = N_{at} N_{orb}$
 ∞

Transport électronique (modélisation du système réel)



$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L G_C \Gamma_R G_C^+)$$

$$G_C = (E - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \longrightarrow \text{Fonction de Green du contact}$$

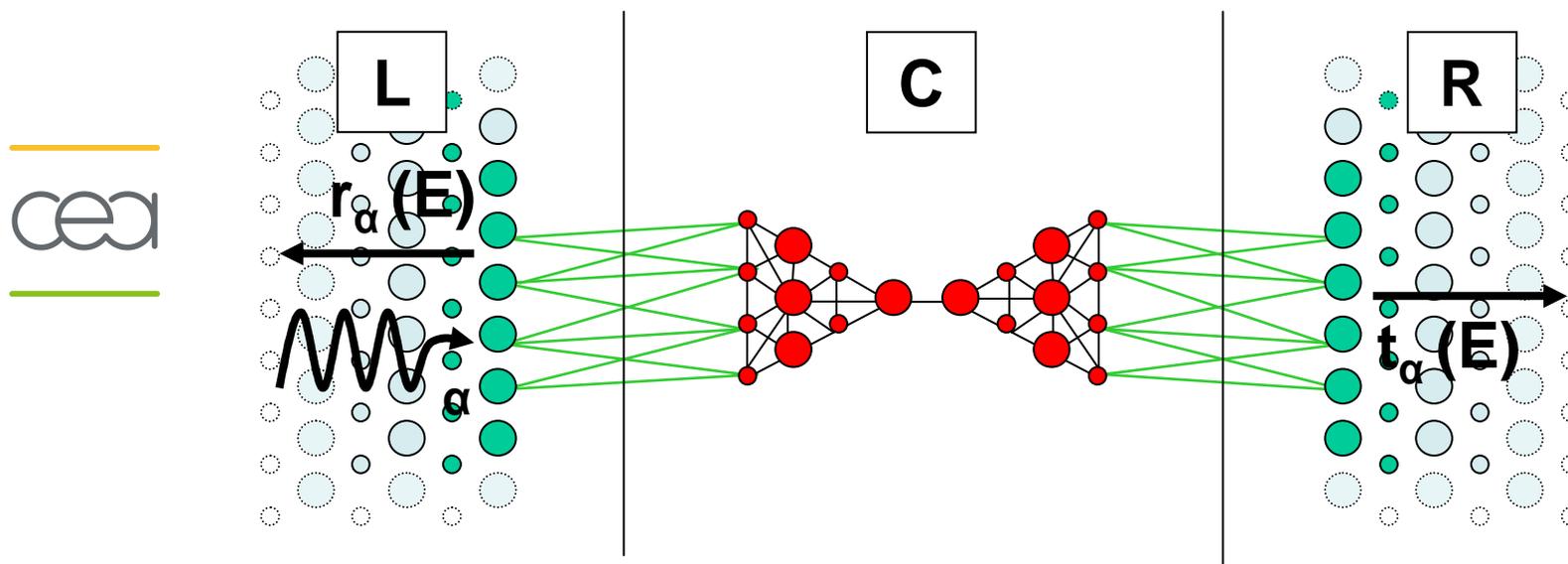
$$\Gamma_{L/R} = i(\Sigma_{L/R} - \Sigma_{L/R}^*)$$

$$\Sigma_{L/R} = V_{L/R/C} (E - H_{L/R})^{-1} V_{L/R/C}^t \longrightarrow \text{Self-energy des électrodes}$$

$$g_{L/R}^s(E)$$

Fonction de Green de surface

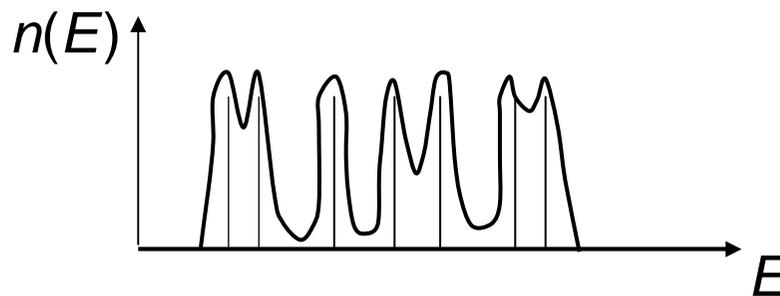
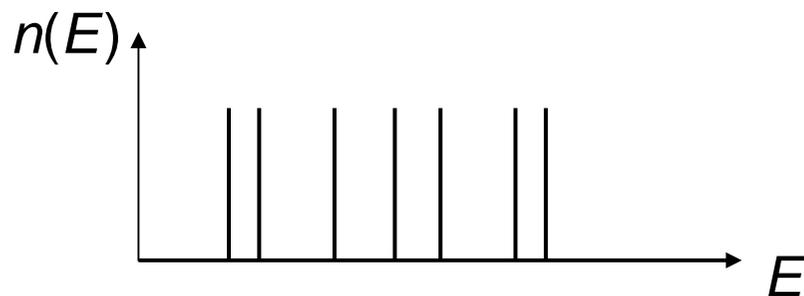
Transport électronique (modélisation du système réel)



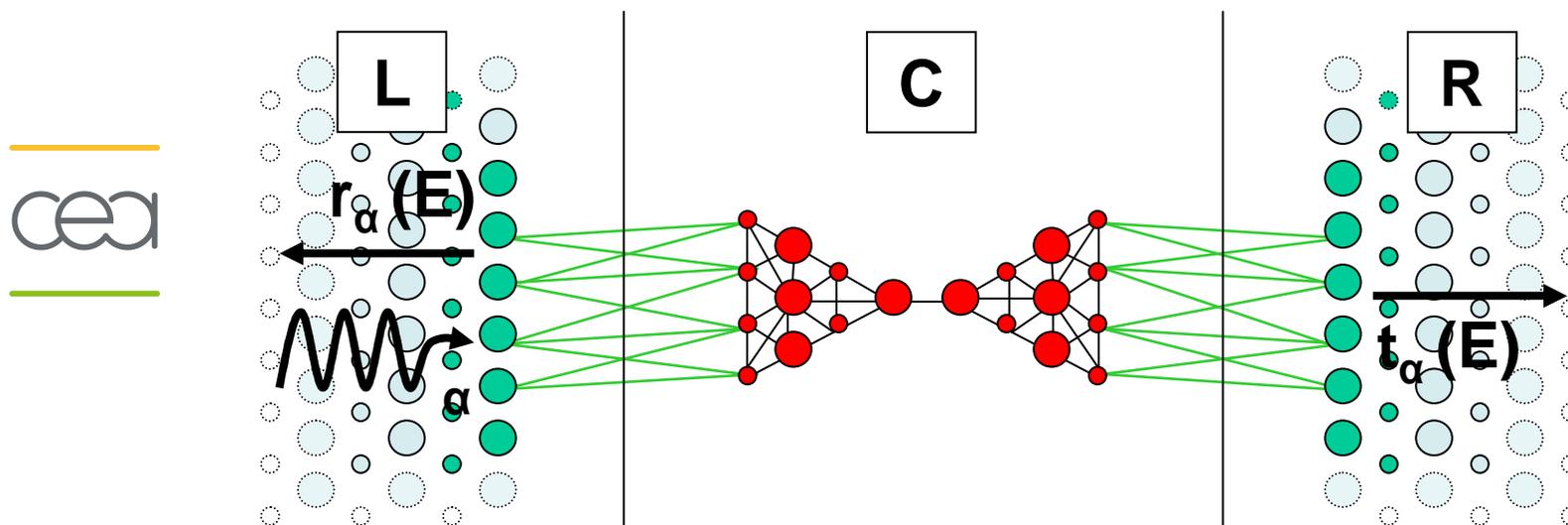
$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L G_C \Gamma_R G_C^+)$$

$$G_C = (E - H_C)^{-1}$$

$$G_C = (E - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1}$$



Transport électronique (modélisation du système réel)



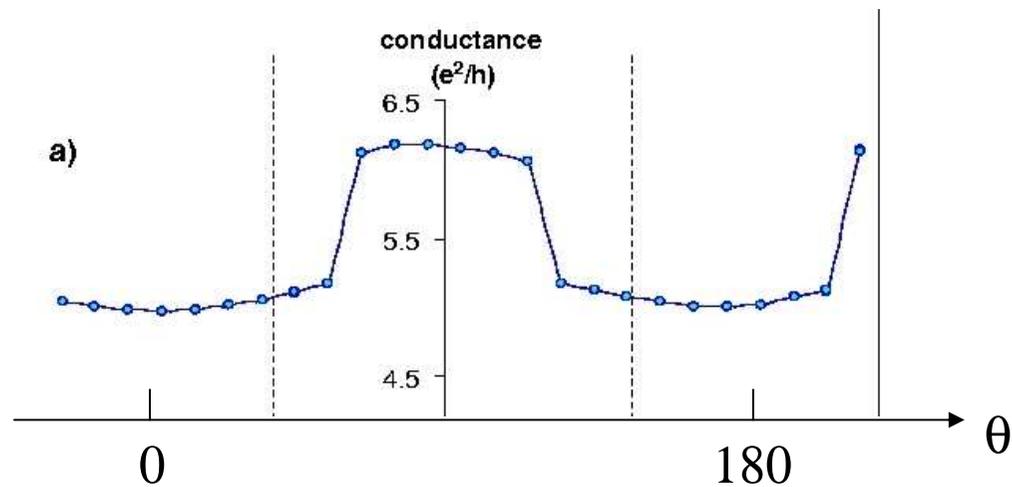
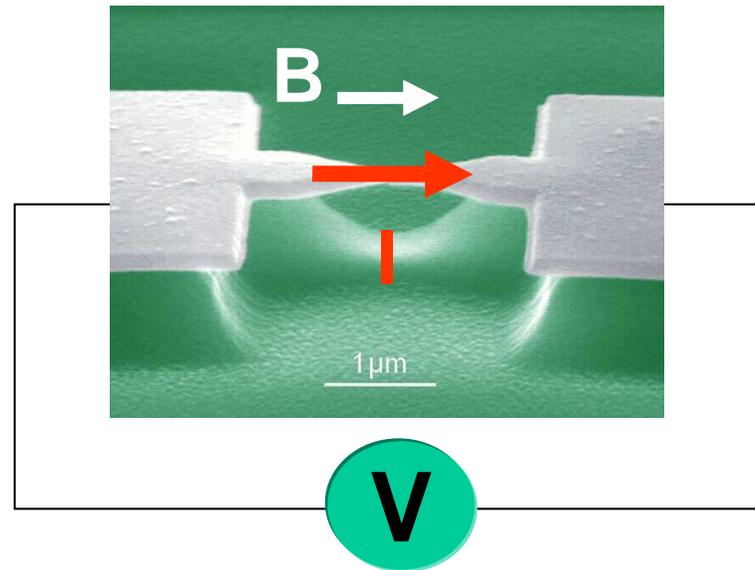
$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L G_C \Gamma_R G_C^+)$$

$$T(E) = \text{Tr}(tt^+) = \sum_{\alpha} |\tau_{\alpha}|^2 \quad ; \quad 0 < |\tau_{\alpha}|^2 < 1$$

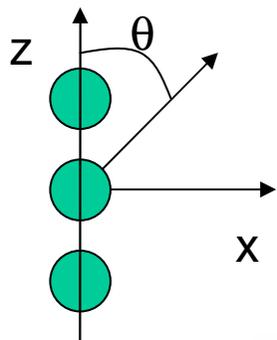
Retour à notre problème

Magnétorésistance anisotrope dans les jonctions à cassure magnétiques

cea

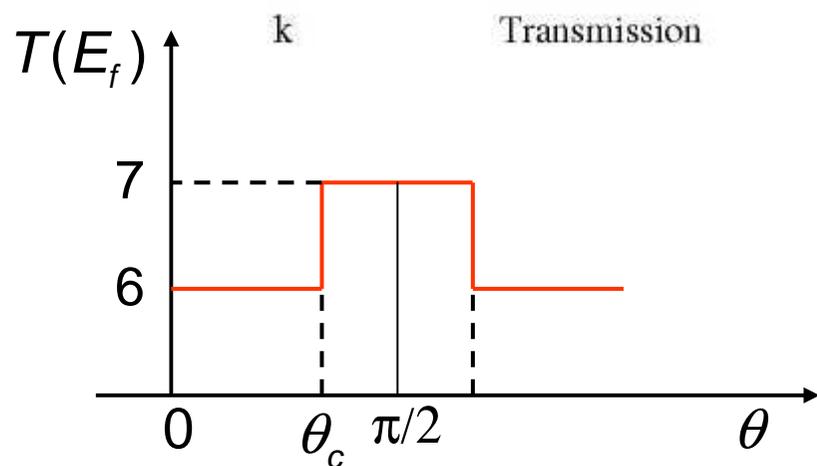
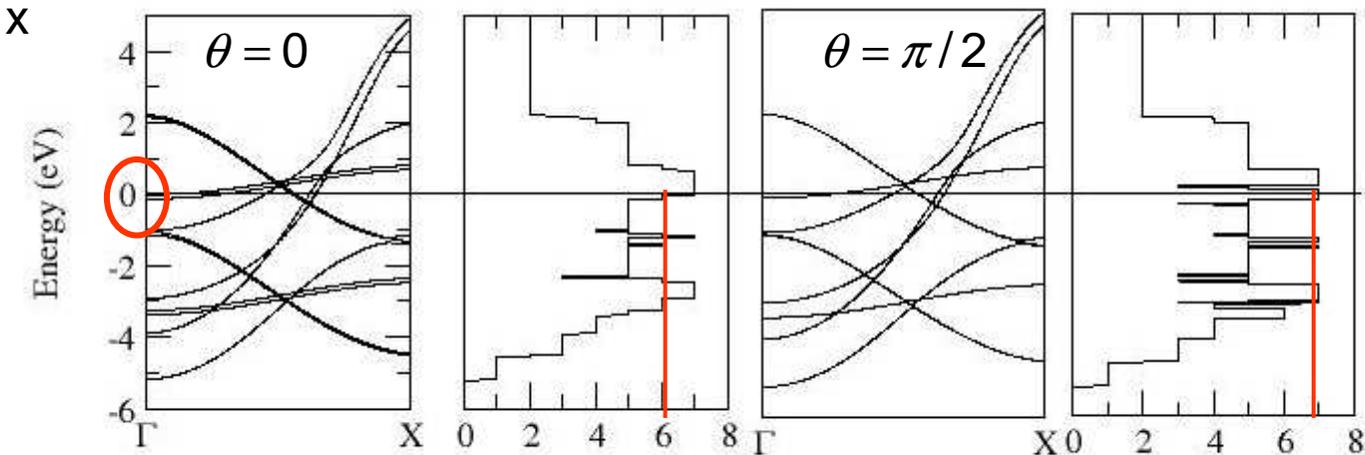


Interprétation séduisante

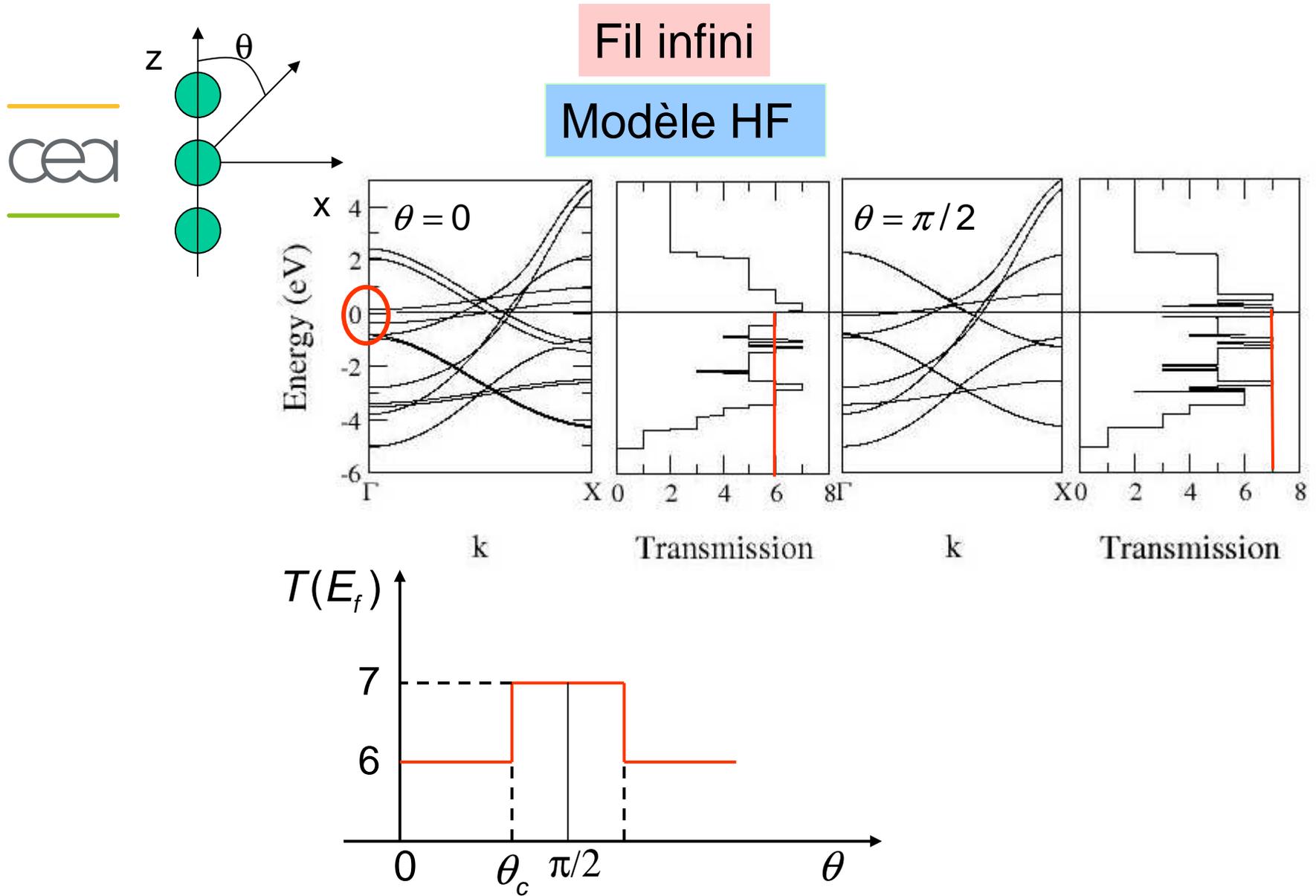


Fil infini

Modèle de Stoner



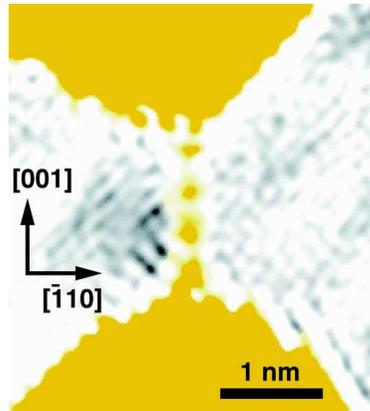
Interprétation séduisante



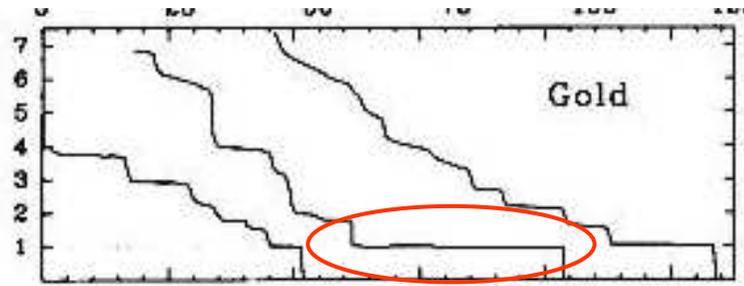
Interprétation séduisante **mais simpliste**

- Existence de nanofils très peu probable

cea



Seuls Au, Pt et Ir forment des fils



H. Ohnishi, Y. Kondo and K. Takayanagi, Nature 295, 780 (1998)

- Ordre de grandeur de la conductance

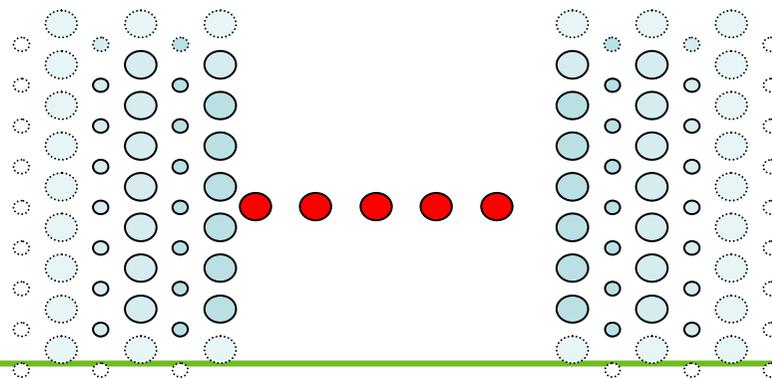
Exp. $\sigma \sim 3 \frac{e^2}{h}$

nanofil $\sigma \sim 6 \frac{e^2}{h}$

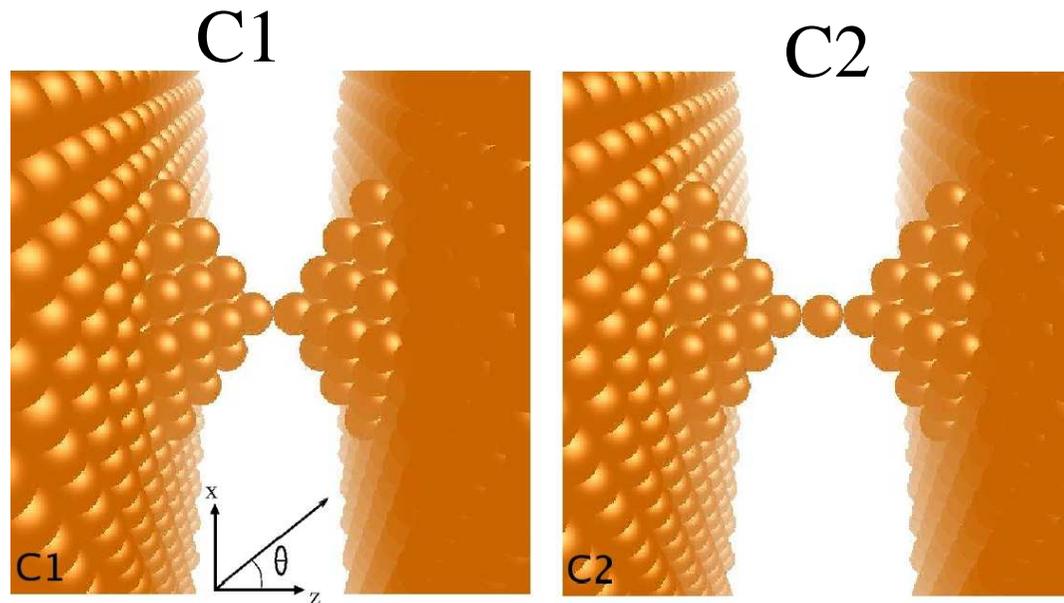
- Rôle des contacts?

Réflexion aux interfaces

Couplage magnétique avec les électrodes



Transport électronique d'une jonction réaliste



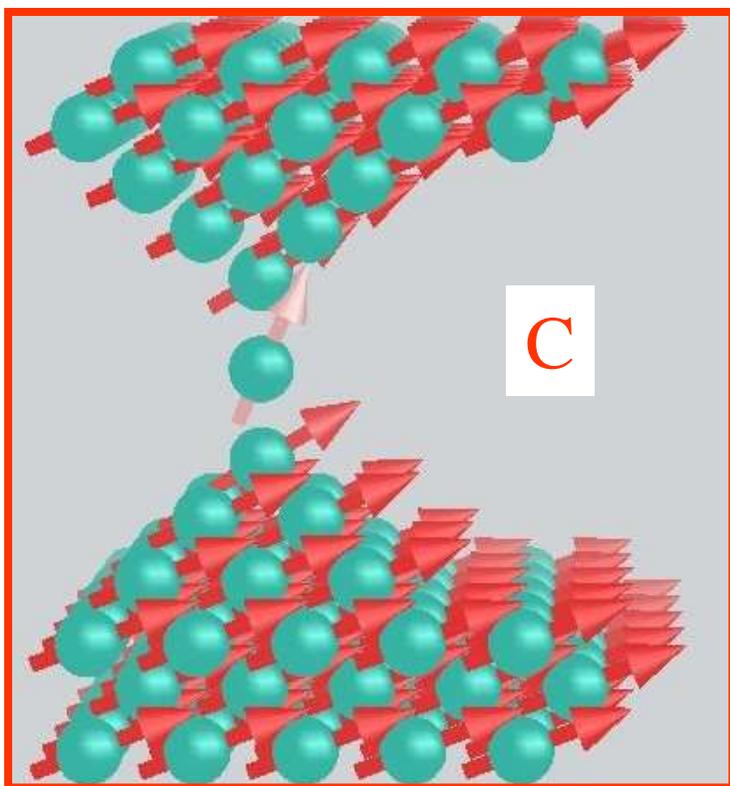
Modèle de Stoner et Modèle HF

Champ magnétique $B=2T$

Configurations non colinéaires

Transport électronique d'une jonction réaliste

Calcul de structure électronique sur le « nanocontact » C



Détails techniques

Résolution de l'équation de Schrödinger sur le système fini: C

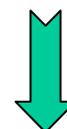
$$N_{at} \sim 150$$
$$N_{spin-orb} = 2 \times 9 \quad N = N_{at} \times N_{spin-orb} = 2700$$

Conditions aux limites périodiques

Critère de convergence stricte

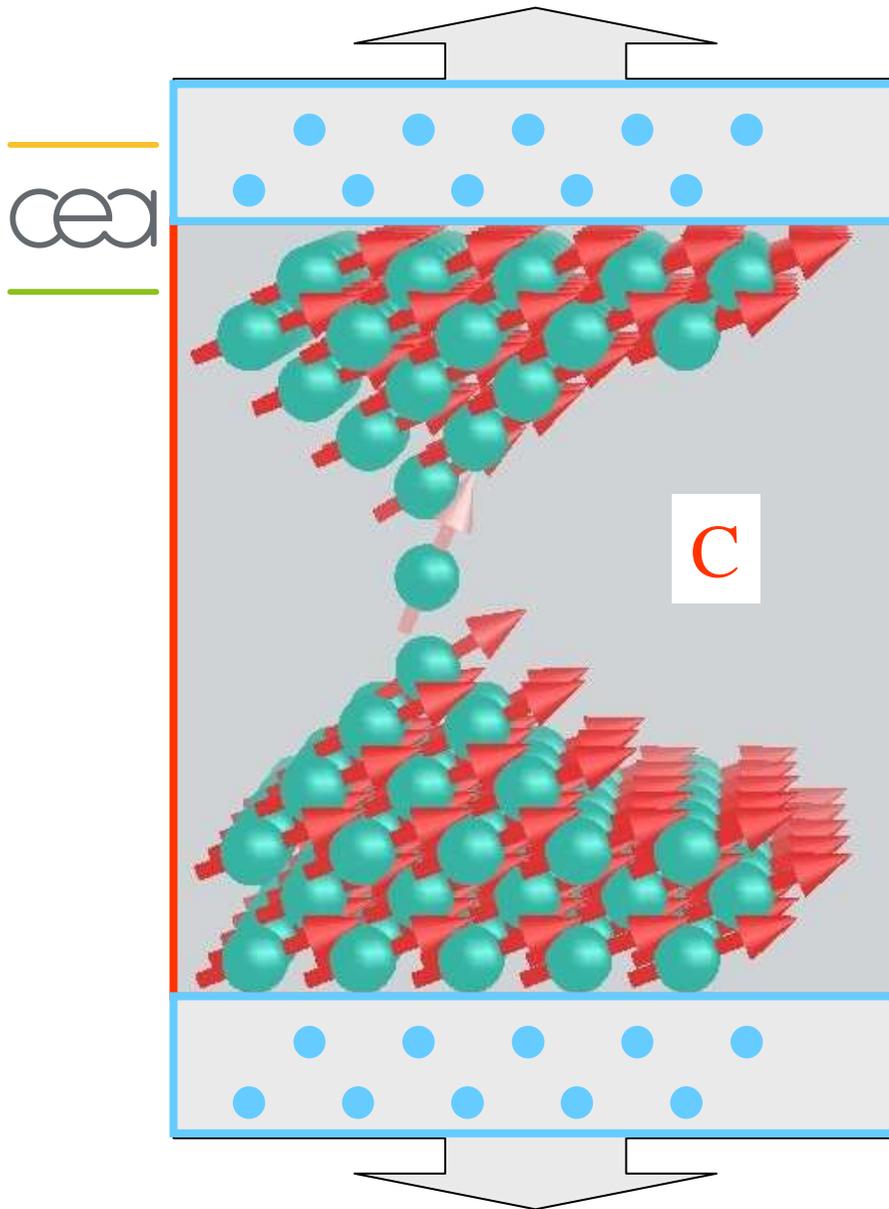
$$\delta n = |n_{out} - n_{in}| < 10^{-5} (e)$$

$$\delta E = |E_{out} - E_{in}| < 10^{-5} (eV)$$



$$(H_C)_{i\lambda\sigma, j\mu\sigma'}$$

Transport électronique d'une jonction réaliste



Calcul de la conductance

Détails techniques

Raccordement avec les électrodes
(répétition d'une bicouche de volume)

Calcul des fonctions de Green de Surface:
méthode itérative

$$\boxed{H_0} \text{---} V \text{---} \boxed{H_0} \text{---} V \text{---} \boxed{H_0} \text{---} V \text{---} \boxed{H_0}$$

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \ddots & H_0 & V & 0 & 0 \\ \ddots & V^+ & H_0 & V & 0 \\ \dots & 0 & V^+ & H_0 & V \\ \dots & 0 & 0 & V^+ & H_0 \end{pmatrix}$$

$$g^S(E) = (E - H_0 - Vg(E)V^+)^{-1}$$

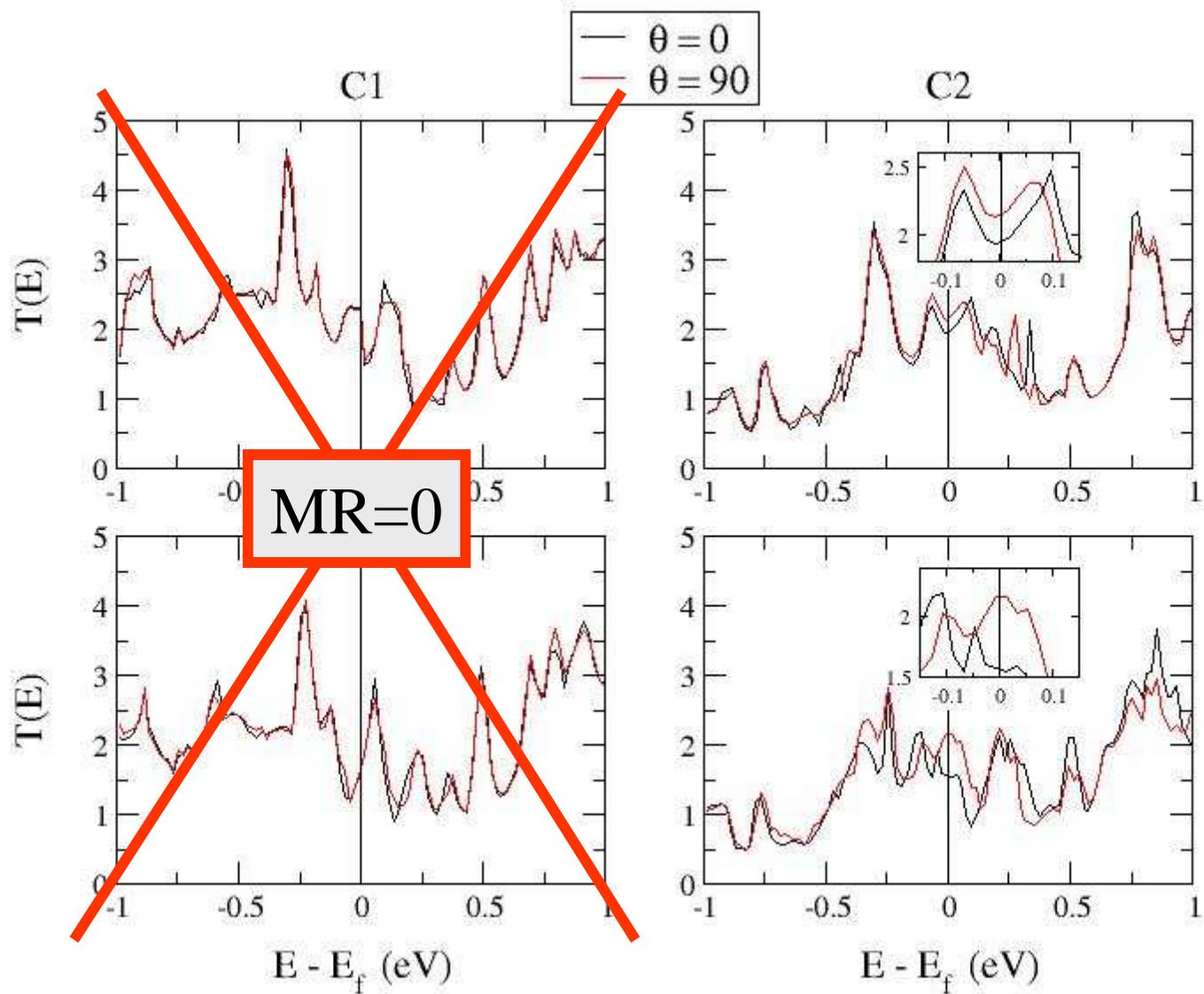
$$T(E) = \text{Tr}(\Gamma_L G_C \Gamma_R G_C^+)$$

Transport électronique d'une jonction réaliste



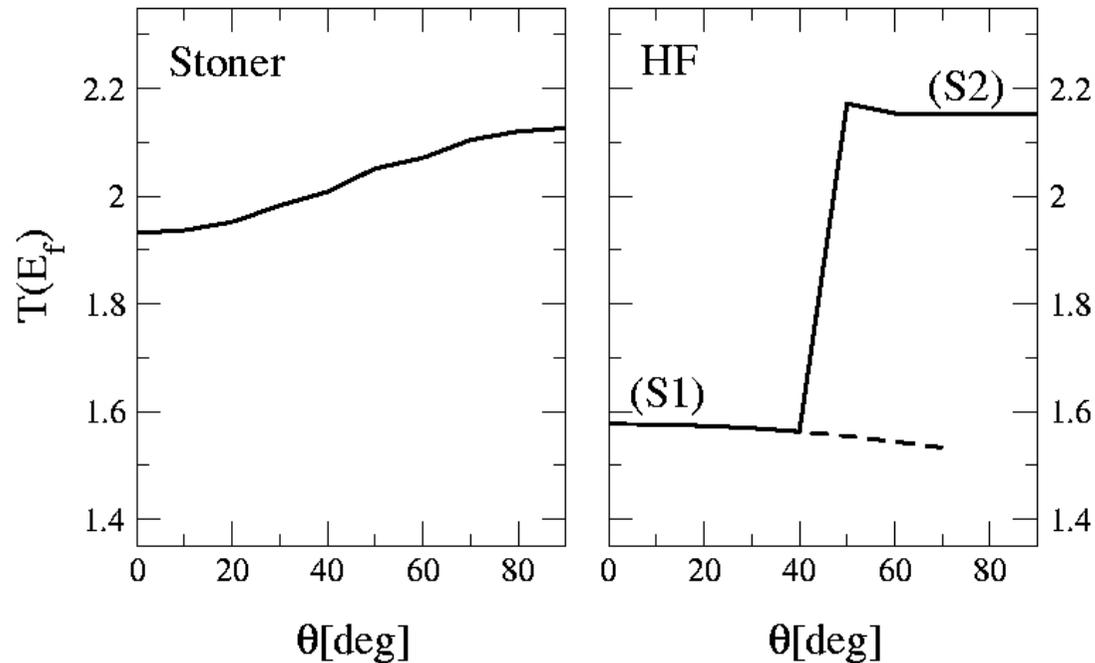
Stoner

HF



Transport électronique d'une jonction réaliste

Courbe de magnéto-résistance



La conductance n'est pas multiple de $\frac{e^2}{h}$

Bon signe de la MR

MR~10%

Courbe continue

Bon signe de la MR

MR~30%

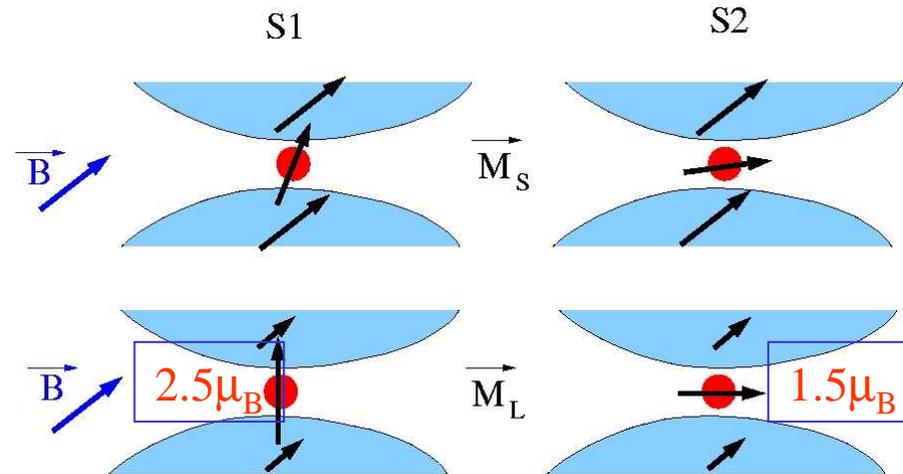
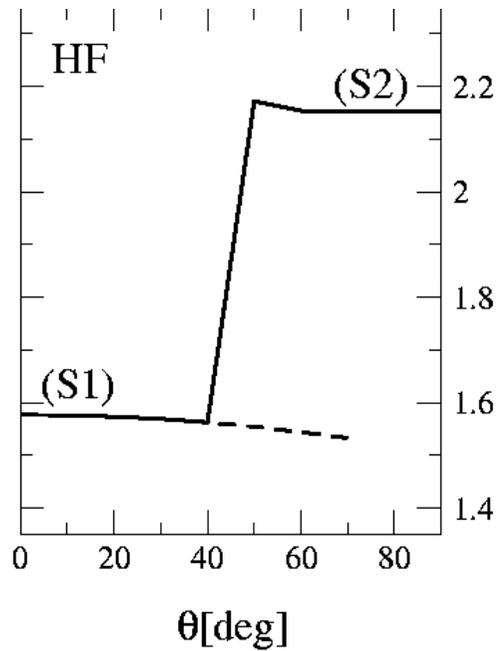
Discontinuité de la courbe de MR

Transport électronique d'une jonction réaliste

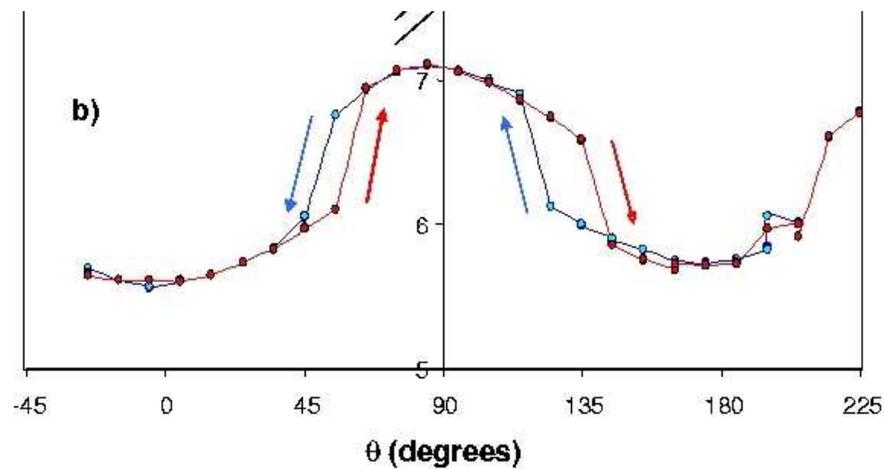
2 solutions magnétiques



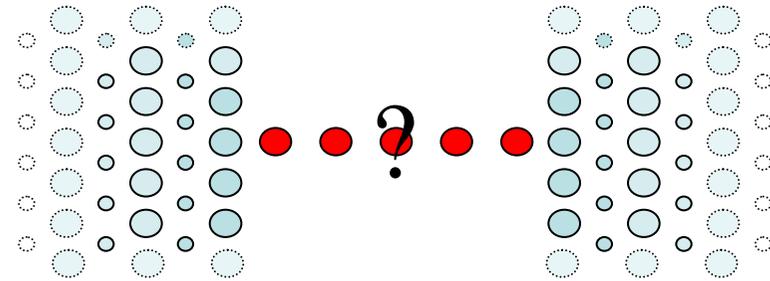
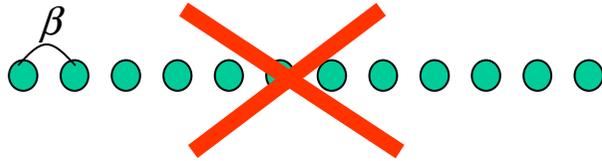
2 plateaux de conduction



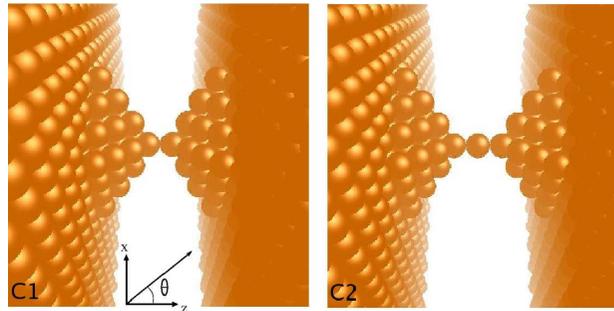
Hystérésis



Importance de considérer un système réaliste



Rôle essentiel de la géométrie locale



Rôle « exacerbé » des interactions électroniques au niveau du contact

L'anisotropie des interactions électroniques est renforcé pour des systèmes de basse dimension de faible symétrie

Etudier et proposer de nouveaux matériaux



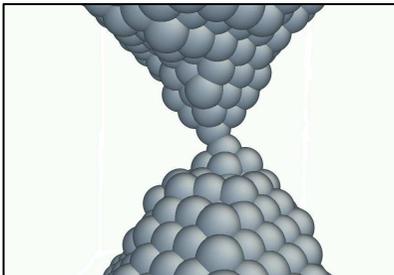
Pt, CoPt, FePt

Fort couplage spin-orbite du Pt

Obtention de fil atomique

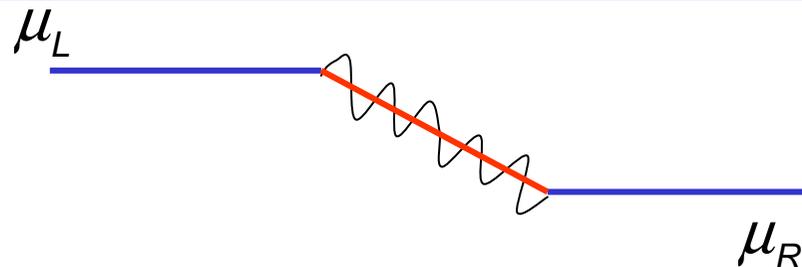
Magnétisme de Fe, Co et (presque) magnétisme de Pt

Simulation de dynamique moléculaire



- potentiel empirique: pas de fil!
- liaisons-fortes?

Influence de la différence de potentiel





MERCI DE VOTRE ATTENTION