



**HAL**  
open science

# Théorie de Boltzmann chirale pour le transport dans les multicouches, électrons et photons, balistique et diffusif

Nicolas Charpentier

► **To cite this version:**

Nicolas Charpentier. Théorie de Boltzmann chirale pour le transport dans les multicouches, électrons et photons, balistique et diffusif. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2012. Français. NNT : 2012PA112008 . tel-00675443

**HAL Id: tel-00675443**

**<https://theses.hal.science/tel-00675443>**

Submitted on 1 Mar 2012

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université Paris-Sud 11

Ecole Doctorale de physique de la région  
parisienne (ED 107)

Laboratoire de physique du solide

**Discipline** : Physique

**Thèse de Doctorat**

par

**Nicolas Charpentier**

**Théorie de Boltzmann Chirale pour le  
transport dans les multicouches,  
électrons et photons, balistique et  
diffusif**

Soutenue le 25 janvier 2012

**Composition du Jury :**

Rapporteurs	Xavier Waintal	CEA (Grenoble)
	Chshiev Mairbek	CEA (Grenoble)
Examineurs	André Thiaville	LPS (Orsay)
	Thierry Valet	In Silicio (Aix en Provence)
Directeur de thèse	Marc Gabay	LPS (Orsay)
Co-Directeur de thèse	Frédéric Piéchon	LPS (Orsay)

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction générale</b>	<b>5</b>
1.1	Le contexte de travail . . . . .	5
1.2	Le transport dans les multicouches . . . . .	6
1.2.1	La transition balistique-diffusif . . . . .	6
1.2.2	Les différentes approches du transport . . . . .	8
1.2.3	Les approches macroscopiques et l'équation de Boltzmann	11
1.3	Objectif et plan de la thèse . . . . .	15
<b>2</b>	<b>Transport de charge en structure CPP</b>	<b>17</b>
2.1	Introduction au transport CPP . . . . .	18
2.1.1	La problématique . . . . .	18
2.1.2	L'équation de Boltzmann CPP . . . . .	20
2.1.3	Le modèle Dérive-Diffusion . . . . .	22
2.1.4	Pourquoi aller au delà du modèle dérive-diffusion . . . . .	24
2.2	Le transport de volume : la chiralisation du transport . . . . .	26
2.2.1	Chiralisation de l'équation de Boltzmann . . . . .	26
2.2.2	Base de polynômes . . . . .	28
2.2.3	Grandeurs macroscopiques chirales . . . . .	30
2.2.4	Equations de transport . . . . .	31
2.2.5	Expressions générales des grandeurs macroscopiques . . . . .	34
2.2.6	Potentiel électrochimique généralisé . . . . .	36
2.2.7	La limite Drude . . . . .	37
2.3	Effets de bords et d'interface . . . . .	38
2.3.1	Lois de conservation . . . . .	39
2.3.2	Collisions d'interface . . . . .	40
2.3.3	Développement des taux de collision . . . . .	42
2.3.4	Version macroscopique des collisions d'interface . . . . .	44
2.3.5	Bilan : conditions de bords et d'interfaces . . . . .	45
2.4	La limite dérive-diffusion . . . . .	46
2.4.1	Développement en puissance du nombre de Knudsen . . . . .	47
2.4.2	Changement de base de projection . . . . .	48
2.4.3	Conditions d'interface associées au modèle dérive-diffusion	51
2.5	Conclusion . . . . .	53
2.6	Complément : formulations équivalentes des effets d'interface . . . . .	54
2.6.1	Approche du type matrice de transfert . . . . .	54
2.6.2	Approche mixte . . . . .	58

<b>3</b>	<b>Quelques conséquences du modèle collisionnel</b>	<b>61</b>
3.1	Représentation en terme de potentiel électrochimique . . . . .	61
3.1.1	Introduction . . . . .	61
3.1.2	Expression du modèle collisionnel en fonction du potentiel électrochimique . . . . .	62
3.1.3	Expression du modèle dérive-diffusion en fonction du potentiel électrochimique . . . . .	66
3.2	Résistance deux terminaux . . . . .	67
3.2.1	Expression générale de la résistance deux terminaux . . . . .	67
3.2.2	Quelques illustrations simples . . . . .	69
3.3	Transport non local . . . . .	72
3.3.1	Introduction . . . . .	72
3.3.2	Grandeurs macroscopiques en l'absence de courant . . . . .	75
3.3.3	Résistance non locale . . . . .	77
3.4	Conclusion . . . . .	81
<b>4</b>	<b>Transport dans les vannes de spin colinéaires</b>	<b>82</b>
4.1	Introduction . . . . .	82
4.1.1	Les vannes de spin . . . . .	82
4.1.2	Le modèle Valet-Fert . . . . .	85
4.2	Polarisation en spin du modèle collisionnel . . . . .	86
4.2.1	Equations de transport . . . . .	86
4.2.2	Profils des grandeurs macroscopiques . . . . .	88
4.2.3	Conditions de bords et d'interface . . . . .	90
4.2.4	Expressions des conditions de bords et d'interface en termes de potentiel électrochimique . . . . .	92
4.2.5	Potentiel électrochimique généralisé . . . . .	93
4.2.6	La limite Valet-Fert . . . . .	94
4.3	Conclusion . . . . .	95
<b>5</b>	<b>Modèle collisionnel et transfert radiatif</b>	<b>96</b>
5.1	Transfert radiatif . . . . .	97
5.1.1	Rayonnement dans un milieu désordonné . . . . .	97
5.1.2	Luminance et équation de transfert radiatif . . . . .	97
5.1.3	Equations de transport macroscopique . . . . .	99
5.2	Le problème de Milne . . . . .	102
5.2.1	Présentation du problème . . . . .	103
5.2.2	L'apport des chiralités . . . . .	106
5.2.3	Condition de bord mixte . . . . .	109
5.3	La méthode des flux . . . . .	110
5.3.1	Présentation générale de la méthode . . . . .	111
5.3.2	Méthode des flux et équation de Boltzmann . . . . .	113
5.4	Conclusion . . . . .	115
<b>6</b>	<b>Transport dans les structures CIP</b>	<b>116</b>
6.1	Introduction au transport CIP . . . . .	116
6.1.1	La problématique . . . . .	116
6.1.2	Le modèle de Fuchs-Sondheimer . . . . .	118
6.1.3	Nécessité d'aller plus loin . . . . .	119
6.2	Le modèle collisionnel pour le transport CIP . . . . .	121

6.2.1	Au delà du temps de relaxation . . . . .	121
6.2.2	Transport CIP et accumulation . . . . .	123
6.2.3	Profil universel de conductivité . . . . .	125
6.2.4	Les conditions de bords et d'interfaces . . . . .	127
6.2.5	Mise en oeuvre pratique . . . . .	131
6.2.6	La polarisation en spin . . . . .	133
6.3	Les apports du modèle collisionnel . . . . .	134
6.3.1	Effets des paramètres d'interface sur la conductivité . . . . .	134
6.3.2	La limite Fuchs-Sondheimer . . . . .	137
6.3.3	Comparaison avec une approche projective . . . . .	138
6.3.4	Modèle macroscopique . . . . .	144
6.4	Conclusion . . . . .	146
<b>7</b>	<b>Approche variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer</b>	<b>147</b>
7.1	Le modèle de Fuchs-Sondheimer . . . . .	148
7.1.1	Quelques rappels du modèle . . . . .	148
7.1.2	Interprétation des réflexions d'interface . . . . .	150
7.2	Mise sous forme variationnelle . . . . .	152
7.2.1	Réécriture du modèle de Fuchs-Sondheimer . . . . .	153
7.2.2	Développement itératif des fonctions de distribution . . . . .	155
7.2.3	Écriture variationnelle du problème . . . . .	157
7.2.4	Solution variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer . . . . .	159
7.3	Conclusion : origine du modèle collisionnel . . . . .	161
<b>8</b>	<b>Synthèse et perspectives</b>	<b>164</b>
8.1	Synthèse . . . . .	164
8.1.1	Le modèle collisionnel : une approche unifiée du transport	164
8.1.2	Les Chiralités . . . . .	167
8.1.3	Courant CIP et Courant CPP . . . . .	168
8.2	Perspectives . . . . .	169
<b>A</b>	<b>Projection de l'équation de Boltzmann</b>	<b>171</b>
A.1	Projection sur les polynômes de Legendre standards . . . . .	171
A.2	Projection sur les polynômes chiraux . . . . .	172
A.2.1	Projection . . . . .	172
A.2.2	Solution à l'ordre un . . . . .	174
<b>B</b>	<b>Conditions d'interface</b>	<b>177</b>
B.1	Dérivation des règles de somme . . . . .	177
B.2	Version macroscopique des conditions d'interface . . . . .	178
<b>C</b>	<b>Détails de calculs pour les vanes de spin colinéaires</b>	<b>181</b>
C.1	Les équations de transport . . . . .	181
C.1.1	Chiralisation de l'équation de Boltzmann . . . . .	181
C.2	Projection de l'équation de Boltzmann . . . . .	182
C.2.1	Éléments de calcul de la solution à l'ordre un . . . . .	183
C.3	Grandeurs macroscopiques lorsque $\ell_{\uparrow} = \ell_{\downarrow}$ . . . . .	186
C.4	Polarisation en spin des effets d'interface . . . . .	188
C.4.1	Généralisation des collisions d'interfaces . . . . .	188
C.4.2	Lois de conservation et règles de somme . . . . .	189

---

C.4.3	Equations d'interface macroscopiques . . . . .	191
C.5	Approche matrice de transfert pour les conditions d'interfaces . .	191
C.5.1	Définition . . . . .	191
C.5.2	Règles de somme . . . . .	193
C.5.3	Relations d'orthogonalité . . . . .	194
C.5.4	Equations d'interface macroscopiques . . . . .	197
<b>D</b>	<b>Annexe sur le transport CIP</b>	<b>198</b>
D.1	Projection de l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Tche- bychev . . . . .	198
D.2	Projection des conditions d'interfaces . . . . .	199
D.3	L'exponentielle intégrale . . . . .	201
D.4	Expression des fonctions $\psi$ . . . . .	202
D.5	Polarisation en spin . . . . .	202
<b>E</b>	<b>Annexe de la méthode variationnelle</b>	<b>204</b>
E.1	Etablissement de la transformation du modèle . . . . .	204
E.2	Solutions exactes des équations de la nouvelle représentation . .	206
E.3	Calcul des fonctions de Green . . . . .	208

# Chapitre 1

## Introduction générale

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Le contexte de travail . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>1.2</b>	<b>Le transport dans les multicouches . . . . .</b>	<b>6</b>
<b>1.3</b>	<b>Objectif et plan de la thèse . . . . .</b>	<b>15</b>

---

### 1.1 Le contexte de travail

Cette thèse porte sur la modélisation du transport dans des structures multicouches composées de matériaux ayant des propriétés individuelles différentes. Le transport dans les multicouches intervient dans de multiples domaines. Son domaine de prédilection est sans doute celui de l'électronique<sup>1</sup> ([1] à [177]) pour lequel la miniaturisation incessante des composants ainsi que la recherche de nouvelles fonctionnalités nécessite une compréhension de plus en plus fine du transport électrique aux dimensions réduites. Outre le transport électrique, il trouve un intérêt dans la compréhension de la propagation de la lumière dans les milieux désordonnés ([178] à [207]) ou encore dans l'étude de la conduction thermique par les phonons ([208] à [240]). En parcourant la littérature, on peut voir émerger une problématique commune à ces trois domaines : comprendre les propriétés de transport (électrique, thermique, lumineux, ...) à des échelles de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen des porteurs de l'information (électrons, phonons, photons, ...). Cette problématique est d'autant plus unificatrice que les formalismes utilisés sont très similaires d'un domaine à l'autre.

La compréhension du transport dans les multicouches est donc un problème important caractéristique de la physique hors-équilibre plutôt que d'un domaine particulier. Ainsi, si au cours de cette thèse nous avons concentré nos efforts sur le transport électrique, les idées développées dans ce travail trouvent également des applications dans le transport lumineux et thermique. Pour comprendre l'objectif de cette thèse, nous allons donner une présentation générale de la spécificité du transport dans les multicouches afin de faire émerger une problématique

---

1. aussi bien à base de semi-conducteurs que de matériaux magnétiques (spintronique).

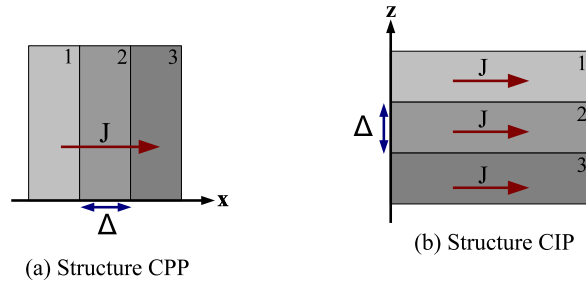


FIGURE 1.1 – Définition du transport CPP (figure (a)) et CIP (figure (b)). Dans les structures CPP, le courant ( $J$ ) circule perpendiculairement aux interfaces qui séparent les couches alors qu'il circule parallèlement à celles-ci en configuration CIP. Pour ces géométries, chaque couche est caractérisée par son épaisseur  $\Delta$  et son libre parcours moyen  $\ell$ .

qu'on solutionnera tout au long de ce manuscrit.

Dans cette thèse, nous concentrerons notre attention sur deux configurations de transport particulières (figure 1.1) : le transport CPP (Current Perpendicular to the planes) (figure 1.1 (a)) pour lequel le courant circule perpendiculairement aux interfaces et le transport CIP (Current In Planes) (figure 1.1 (b)) pour lequel le courant se propage parallèlement aux différentes interfaces séparant les couches. Ces deux géométries de transport tiennent une place importante tant sur le plan expérimental que théorique.

## 1.2 Le transport dans les multicouches

### 1.2.1 La transition balistique-diffusif

L'étude du transport dans les multicouches vise à comprendre les effets d'épaisseurs sur certaines grandeurs macroscopiques lorsqu'on applique des contraintes particulières aux limites du système. Par exemple, on cherche à déterminer l'évolution de la conductance lorsqu'on applique une différence de potentiel électrique aux bornes de la structure (figure 1.3) ; on souhaite comprendre les propriétés transmissives d'un échantillon lorsqu'on envoie un faisceau lumineux à l'une des extrémités (figure 1.4) ou encore la répartition du flux d'énergie lorsqu'on applique une différence de température (figure 1.5).

Ces structures résultent d'un assemblage de matériaux (métaux normaux ou magnétiques, semi-conducteur ou isolant) avec des propriétés de volume différentes. Les différents matériaux sont donc séparés par des zones de transition appelées interfaces. La particularité de ces systèmes est qu'ils possèdent une ou plusieurs dimensions, qu'on notera génériquement  $\Delta$  (voir la figure 1.1), de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen ( $\ell$ ) des porteurs. A ces échelles nanométriques, la dépendance en épaisseur des grandeurs physiques diffère alors



notamment des lois linéaires de grandes épaisseurs (voir par exemple les figures 1.3, 1.4 et 1.5 mais aussi [153], [179], [205], [223], [224], [233]) car les propriétés de transport sont différentes.

Ces changements de comportement peuvent être compris par l'introduction d'un nombre sans dimension, le nombre de Knudsen ( $\kappa$ ), qui mesure le rapport entre le libre parcours moyen  $\ell$  et l'épaisseur  $\Delta$  :

$$\kappa = \frac{\ell}{\Delta} \quad (1.1)$$

Grâce à ce nombre, on peut identifier deux régimes de transport : le régime diffusif pour lequel  $\kappa < 1$  et le régime balistique (ou de Knudsen) lorsque  $\kappa > 1$ . Dans le régime diffusif, l'épaisseur de la couche est plus grande que le libre parcours moyen. Ainsi, en traversant la structure, les porteurs (électrons, photons, phonons, ...) vont subir un grand nombre de diffusions et les collisions de volume vont alors dominer les propriétés physiques du système. Dans le régime balistique, l'épaisseur de la couche est plus petite que le libre parcours moyen et dans ce cas, les porteurs peuvent traverser la couche sans subir de collisions de volume. Dans ce régime, les propriétés physiques sont alors pilotées par les collisions d'interface qui sont le mécanisme de diffusion prépondérant. Ainsi, pour comprendre les effets d'épaisseurs sur l'évolution des quantités macroscopiques, il est nécessaire de savoir décrire la transition entre les deux régimes ce qu'on appelle également les effets de libre parcours moyen.

Cette transition s'observe de multiples façons et nous allons en donner quelques exemples. Dans le régime diffusif, les collisions de volume étant dominantes, les grandeurs moyennes dépendent essentiellement des épaisseurs des couches. C'est ainsi par exemple que la résistance électrique et la résistance thermique d'une structure sont proportionnelles à son épaisseur ( $R \propto \Delta$ , [241], [254]) alors que le coefficient de transmission lumineux est inversement proportionnelle à celle-ci ( $T \propto \Delta^{-1}$ , [202], [203], [245]). Les propriétés globales d'un multicouche s'obtiennent alors par simple association série ou parallèle des propriétés individuelles de chaque couche prise séparément. Ainsi, la transition entre les régimes balistique et diffusif va s'observer par des écarts à ces comportements.

Un exemple caractéristique est sans doute celui de la résistance électrique d'une structure CPP balistique qui est indépendante de l'épaisseur et fortement dépendante des coefficients de transmission des différentes interfaces :

$$R \propto \frac{1}{T} \quad (1.2)$$

Ce résultat, issu du formalisme de Landauer-Buttiker ([11] à [15] et [248]), montre bien l'effet renforcé des interfaces à faible épaisseur.

Un autre exemple est présenté sur la figure 1.3 qui fournit l'évolution de la conductance (courbe noire) d'un tricouche Platine/Cobalt/Platine (figure 1.2) en fonction de l'épaisseur de la couche de cobalt. On observe que la conductance change de comportement lorsque l'épaisseur avoisine le libre parcours moyen du cobalt ( $\ell_{Co} = 5.2$  nm). En dessous du libre parcours moyen, la conductance décroît pour atteindre un plateau à basse épaisseur alors qu'au dessus du libre

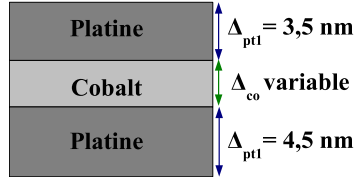


FIGURE 1.2 – La structure CIP correspondant à la courbe de conductance 1.3. Les épaisseurs des couches de platine sont fixées à 3.5 nm et 4.5 nm alors que celle de la couche de cobalt est variable.

parcours moyen, celle-ci à plutôt un comportement linéaire. On constate toutefois que ce comportement linéaire diffère notablement de celui résultant de l'association en parallèle des conductances individuelles ce qui est caractéristique des effets d'interfaces qui restent important dans la mesure où le régime est balistique dans les couches de platine ( $\ell_{Pt} = 13.11 \text{ nm}$ ).

Si les exemples précédents concernaient le domaine du transport électrique, la transition s'observe également pour d'autres types de transport. Par exemple, la figure 1.4 extraite de [206] présente l'évolution du coefficient de transmission d'un échantillon en fonction de son épaisseur lorsqu'on envoie une onde lumineuse collimatée à l'une de ses extrémités. Lorsque l'épaisseur de la couche augmente, on observe un changement de longueur de décroissance du coefficient de transmission. Cette transition s'opère au passage du libre parcours moyen (qui est ici renormalisé par la présence d'absorption).

Comme dernier exemple, on peut citer le changement de comportement de la relation entre le courant thermique et la température ([231] et [232]) lorsqu'on applique une différence de température aux bornes d'un diélectrique en géométrie CPP (figure 1.5). Dans le régime diffusif, le flux d'énergie suit la loi de Fourier :

$$J_{th} = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

où  $\lambda$  est la conductivité thermique et  $T(\mathbf{r})$  le profil de température locale alors que dans le régime balistique, ce courant obéit à une loi similaire à celui du corps noir :

$$J_{th} = \sigma (T_1^4 - T_2^4) \quad (1.4)$$

où  $\sigma$  est l'équivalent de la constante de Stefan-Boltzmann pour les phonons et  $T_1$  et  $T_2$  sont les températures imposées à chaque bord de la couche (figure 1.5). Dans le régime balistique, on constate que le courant dépend fortement des effets de bords ce qui est à rapprocher du comportement 1.2 de la résistance électrique dans le régime balistique.

Nous voyons à travers ces exemples que le problème de la transition balistique-diffusif est commun à plusieurs types de transport.

### 1.2.2 Les différentes approches du transport

De manière générale, l'étude du transport dans les multicouches a fait l'objet de nombreux travaux et ce de multiples façons. En effet, les problèmes de

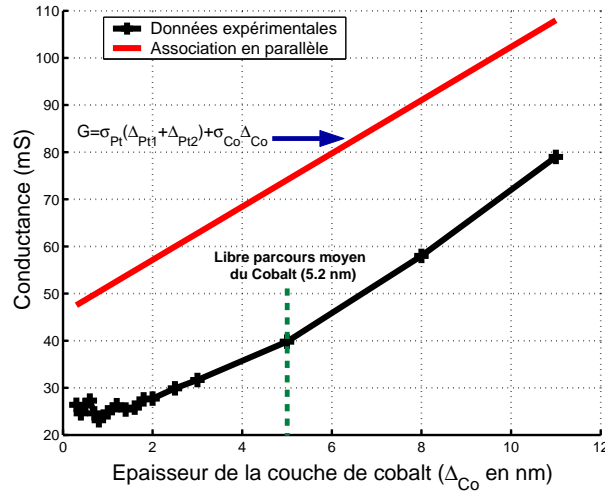


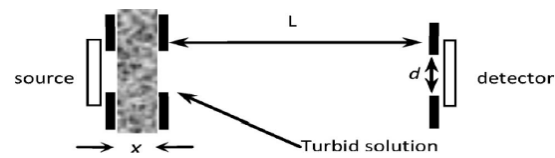
FIGURE 1.3 – Evolution de la conductance d'un tricouche CIP Pt(3.5 nm)/Co( $\Delta_{Co}$ )/Pt(4.5 nm) (figure 1.2) en fonction de l'épaisseur de la couche de Cobalt [147] (courbe noire). On constate un changement de comportement de la conductance lorsque l'épaisseur avoisine le libre parcours moyen du cobalt ( $\ell_{Co} = 5.2$  nm). L'évolution en fonction de l'épaisseur n'est pas reproduite par la loi d'addition en parallèle des conductances individuelles de chaque couche (courbe rouge) ( $\sigma_{Co} = 5.65 \text{ mS.nm}^{-1}$ ,  $\sigma_{Pt} = 5.73 \text{ mS.nm}^{-1}$ ).

transport peuvent être abordés à partir de plusieurs formalismes qui peuvent être hiérarchisés de la manière suivante :

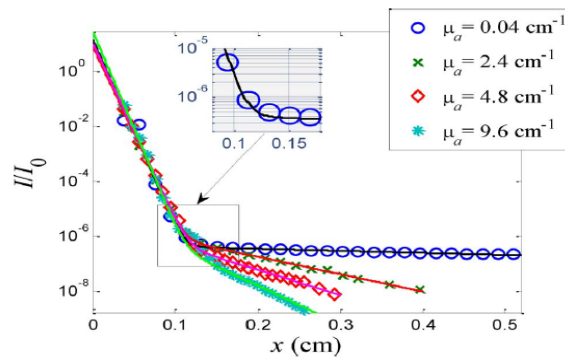
- Les méthodes de fonctions de Green hors-équilibre (NEGF) ([47], [48], [257] [248],[246],[46]) et les méthodes Ab-Initio ([49] et [50]) constituent les méthodes les plus complètes permettant de décrire la physique d'un système hors-équilibre. Ces méthodes, généralement numériques, sont très générales<sup>2</sup> et donnent accès aux différentes fonctions de Green (méthode NEGF) ou aux fonctions d'onde (méthode Ab-Initio) permettant ainsi de calculer toutes les observables d'intérêt (valeurs moyennes ou corrélation).
- Les méthodes précédentes sont extrêmement riches<sup>3</sup> et applicables que le régime de transport soit linéaire ou non. Dans la pratique, il est fréquent que seul le régime linéaire soit d'intérêt et il existe alors des approches adaptées à ce régime courant de transport. La théorie de la réponse linéaire ([247], [249]) permet alors de calculer des coefficients de réponse linéaire traduisant la réaction du système sous l'action d'une perturbation donnée. Plus particulièrement, la formule de Kubo-Greenwood ([63], [162] à [177],[247], [245], [249]) relie le tenseur non local de conductivité à la fonction de Green retardée et le formalisme de Landauer-Buttiker ([11] à [15], [247], [248] ou [246]) fournit une interprétation intuitive de la conductance d'un système en terme de transmissibilité. Ce coefficient de transmission est

2. C'est à dire qu'elles ne font pas d'hypothèses particulière sur le système étudié.

3. Elles contiennent beaucoup d'informations.



(a)



(b)

FIGURE 1.4 – Evolution du coefficient de transmission (figure (b)) d'un milieu désordonné en fonction de son épaisseur (note  $x$  ici (figure (a))) pour différentes valeurs du coefficient d'absorption (figures extraites de [206]). On constate un changement de longueur de décroissance du coefficient de transmission lorsqu'on fait varier son épaisseur ce qui est caractéristique de la transition balistique-diffusif.

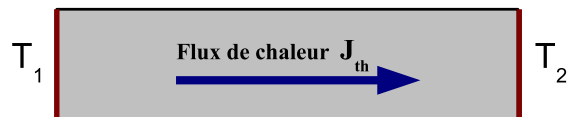


FIGURE 1.5 – Lorsqu'on applique une différence de température aux bornes d'un diélectrique ([231] et [232]), la relation entre le flux de chaleur  $J_{th}$  et la température change de structure : on passe de la loi de Fourier  $J_{th} = -\lambda \nabla T$  en régime diffusif à une loi caractéristique de la lumière en régime balistique  $J_{th} = \sigma (T_1^4 - T_2^4)$ .

alors déterminé soit par un calcul de fonction d'onde, de fonction de Green ou en utilisant la théorie des matrices aléatoires ([20], [21], [22]). Notons également que pour le régime linéaire, il existe les circuits théoriques ([64]) qui consistent à appliquer les lois de Kirchhoff ([241]) des circuits électriques macroscopiques à des échelles nanométriques en incluant des effets quantiques.

- Les formalismes présentés jusqu'à maintenant constituent des approches quantiques du transport qui sont en particulier bien adaptées pour étudier la transition balistique-diffusif puisqu'ils permettent de décrire la physique à des échelles inférieures au libre parcours moyen<sup>4</sup> en tenant compte de la nature ondulatoire des particules. En particulier, ces modèles tiennent compte des effets d'interférences quantiques qui dans certains cas peuvent être moyennés à zéro. Lorsqu'il en est ainsi, on se trouve dans un régime incohérent et les approches classiques du transport sont alors adaptées. On trouve alors deux techniques qui sont liées l'une à l'autre : l'équation cinétique de Boltzmann ([249] à [252]) qui décrit la dynamique de la fonction de distribution à une particule dans l'espace des phases et les approches macroscopiques ([1], [29] à [45], [60], [61], [62], [242], [243]) qui utilisent des équations de transport portant directement sur les quantités macroscopiques que l'on cherche à déterminer (courant, densité, ...). Ces deux approches sur lesquelles nous allons revenir plus en détails au paragraphe suivant permettent de rendre compte des propriétés de transport en l'absence d'effets quantiques majeurs.

Ainsi, à l'aide de ces différentes techniques, la compréhension du transport électrique dans les structures CIP et CPP a fait l'objet de nombreux travaux ([1] à [146] pour CPP et [147] à [177] pour CIP) et les effets de libre parcours moyen ont été abordés de multiples façons. Pour réaliser ces travaux de thèses, nous avons utilisé l'équation de Boltzmann pour la problématique que l'on introduit maintenant.

### 1.2.3 Les approches macroscopiques et l'équation de Boltzmann

Dans la pratique, les structures multicouches sont caractérisés par des quantités macroscopiques qui moyennent plusieurs processus microscopiques. Par exemple, on s'intéresse à la résistance globale de la structure ou la répartition de certaines grandeurs macroscopiques (courant, densité, température, potentiel électrochimique, ...). L'idéal serait alors de pouvoir établir un modèle de transport portant directement sur ces quantités ce qui permet en particulier de mettre en évidence les liens entre les diverses grandeurs macroscopiques.

De façon générale, toute grandeur macroscopique  $g$  vérifie une loi de conservation du type ([242], [250]) :

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{J}_g = S(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

4. de l'ordre de la longueur de de Broglie des particules.

Dans cette équation,  $\mathbf{J}_g$  désigne le courant associé à la grandeur  $g$  et  $S(\mathbf{r}, t)$  représente les différentes sources pouvant produire ou détruire la quantité  $g$ . Notons que  $g$  et  $S$  peuvent être des quantités scalaires, vectorielles ou tensorielles alors que le courant associé  $\mathbf{J}_g$  est une grandeur vectorielle ou tensorielle. Cette équation traduit simplement une loi de bilan local pour la grandeur macroscopique  $g$  : la variation locale de  $g$  ( $\partial_t g$ ) est provoquée par les flux ( $\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{J}_g$ ) qui la propage et la source  $S(\mathbf{r}, t)$  qui la produit ou la détruit. L'exemple le plus connu d'une telle équation est sans doute celle de la conservation de la charge :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (1.6)$$

où  $n$  et  $\mathbf{J}$  désignent respectivement la densité et le courant de charge.

Comprenons bien que ces lois générales de conservation sont toujours valables quel que soit le régime de transport (ballistique ou diffusif) dans lequel on se trouve. Ainsi, pour traiter un problème, il suffit d'écrire autant d'équations 1.5 qu'il y a de quantités macroscopiques à déterminer. Ces équations sont la plupart du temps couplées entre elles<sup>5</sup> et la difficulté consiste alors à pouvoir en faire un système autonome en déterminant les expressions des courants  $\mathbf{J}_g$  en termes des différentes grandeurs macroscopiques  $g$  en question.

Pour déterminer l'expression de ces courants, il est alors nécessaire de recourir à une théorie plus microscopique comme l'équation de Boltzmann ([249] à [252]). Cette équation, qui joue un rôle central dans toute cette thèse, décrit l'évolution de la fonction de distribution,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , sous l'action des forces en présence et des collisions de volume. Elle peut être dérivée classiquement à partir de l'équation de Liouville et de la hiérarchie BBGKY ([249], [250], [251]) ou quantiquement à partir des équations de Kadanoff-Baym ([257]). L'avantage de cette équation est qu'elle est immédiatement compatible avec les lois de conservation macroscopiques en exprimant les quantités macroscopiques et les courants associés en fonction de la même grandeur, la fonction de distribution. Par exemple, la densité et le courant de particules sont données par les premiers moments (moyenne sur l'impulsion) de la fonction de distribution :

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad J(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (1.7)$$

L'équation de Boltzmann étant applicable pour les deux régimes de transport (ballistique et diffusif), elle est donc adaptée à la détermination d'équations de transport macroscopiques valables pour les deux régimes de transport. La difficulté de l'équation de Boltzmann réside dans sa résolution et le passage à des équations macroscopiques nécessitent de savoir éliminer complètement la variable impulsion dans celle-ci. Pour réaliser cette opération, il existe plusieurs techniques :

- la décomposition de la fonction de distribution sur des bases de fonctions orthogonales qui permettent par exemple d'obtenir le modèle dérive-diffusion ou le modèle Valet-Fert ([1], [60]) ;
- les méthodes de Chapman-Enskog et de Grad ([249], [250], [258], [259]) qui permettent d'aboutir aux équations hydrodynamiques en effectuant

5. voir par exemple l'hydrodynamique ([243]).

des développements autour de fonctions d'équilibres locales.

Ces méthodes permettent alors d'aboutir à des équations macroscopiques en effectuant des développements en moments. En particulier, elles sont très bien adaptées en régime diffusif ( $\kappa < 1$ ) pour lequel un petit nombre de moments suffit. Dans ce régime, les courants sont alors proportionnels aux gradients des quantités macroscopiques ([250], [249]) :

$$\mathbf{J}_g(\mathbf{r}, t) = -\beta \nabla_{\mathbf{r}} g \quad (1.8)$$

où  $\beta$  est une constante caractéristique du volume. Les exemples les plus connus de telles lois sont ceux exprimant le flux de particules ( $\mathbf{J}_p$ ), le courant thermique ( $\mathbf{J}_{th}$ ) et le courant électrique ( $\mathbf{J}_e$ ) en fonction respectivement de la densité ( $n$ ), de la température ( $T$ ) et du potentiel électrique ( $V$ ) :

$$\mathbf{J}_p(\mathbf{r}) = -D \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) \quad \mathbf{J}_{th}(\mathbf{r}) = -\lambda \nabla_{\mathbf{r}} T(\mathbf{r}) \quad \mathbf{J}_e(\mathbf{r}) = -\sigma \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

où la constante de diffusion  $D$ , la conductivité thermique  $\lambda$  et la conductivité électrique  $\sigma$  sont des constantes caractéristiques du volume et indépendantes de l'épaisseur. L'utilisation de ces relations constitutives dans les lois de conservation précédentes (1.5) permet alors de les rendre praticables. En particulier, ces équations sont la plupart du temps du type équation de diffusion. Leur résolution nécessitent alors des conditions de raccord aux interfaces qui sont simplement données par les règles générales de la mécanique des milieux continus. Celles-ci correspondent alors à la continuité de la composante normale des courants ([242]) qui suffisent à fermer complètement le problème.

Si les choses sont relativement faciles à grandes épaisseurs, elle se corse dans le régime de Knudsen ( $\Delta < \text{ou} \sim \ell$ ). En effet, l'expression des courants en terme du simple gradient n'étant plus suffisante, il est alors nécessaire de recourir à des développements en moments de plus en plus élevés pour comprendre le transport à ces échelles ([251], [258]). Cette méthode augmente alors la complexité des équations et il est alors plus judicieux de simuler directement l'équation de Boltzmann. D'autre part, les effets d'interface étant important en régime balistique, une technique courante ([19], [27], [64], [178] à [183], [231], [232], [253], [254]) consiste alors à distinguer la propagation des particules suivant la direction normale aux interfaces (figure 1.6). Si le dédoublement de la fonction de distribution (une pour chaque direction de propagation) facilite le traitement des effets d'interface<sup>6</sup>, il complexifie la résolution de l'équation de Boltzmann et de ce fait la construction de modèle macroscopique capturant des effets du libre parcours moyen.

Etant donnée ces difficultés, des modèles alternatifs ont vu le jour ([19] à [45]). Une approche particulièrement intéressante est fournie par la méthode des flux ([29] à [45]). Ce modèle, initialement développé pour la lumière ([253]) et adapté ensuite pour la physique des semi-conducteurs, constitue une approche phénoménologique visant à développer un modèle macroscopique autonome sans faire appel à une autre théorie plus microscopique sous jacente. La méthode des flux, sur laquelle nous reviendrons dans la suite, est basée sur les équations de

6. comme nous le verrons dans la suite.

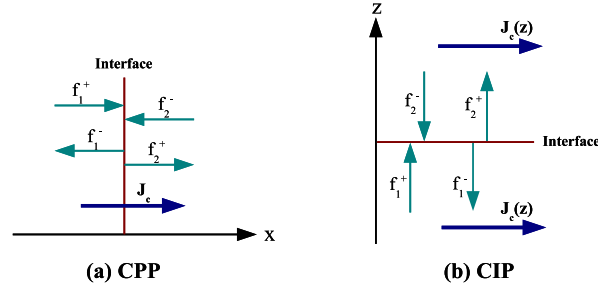


FIGURE 1.6 – Représentation des collisions d’interface pour les deux types de géométrie abordées dans cette thèse. Quelque soit la configuration de transport, les interfaces convertissent les électrons arrivant en électrons sortant et il est alors judicieux de distinguer les particules suivant la direction de propagation normale à l’interface pour décrire simplement les effets d’interface.

transport macroscopiques :

$$\frac{\partial J^\pm}{\partial x} = -\xi J^+ + \xi' J^- \quad (1.10)$$

$$J = J^+ - J^- \quad (1.11)$$

qui portent sur des courants directionnels en distinguant les électrons se propageant vers la droite  $J^+$  de ceux se dirigeant vers la gauche  $J^-$ . Ce modèle essentiellement monodimensionnel est adapté pour le transport CPP. La difficulté essentielle de cette approche est la phénoménologie sur laquelle elle repose. En particulier, ce modèle suppose une relation constitutive courant ( $J^\pm$ ) / densité ( $n^\pm$ ) du type :

$$J^\pm = v n^\pm \quad (1.12)$$

et nécessite certaines recettes pour la détermination des coefficients de rétrodiffusion  $\xi$  et  $\xi'$ .

A travers cette étude, nous voyons qu’il n’existe pas de méthodes adaptées permettant d’extraire de l’équation de Boltzmann un modèle de transport macroscopique applicable aussi bien dans le régime diffusif que le régime balistique et ce en tenant compte de la séparation des porteurs suivant la normale aux interfaces. C’est à cette question que la présente thèse apporte des réponses.

Remarque : Il est intéressant de noter que cette problématique concerne également les transports thermiques ([208] à [240]) et lumineux ([178] à [207]) pour lesquels la propagation des porteurs (phonons ou photons) dans les milieux diffusant peut être étudié à l’aide d’une équation de Boltzmann <sup>7</sup>. Ces analogies, sur lesquelles nous reviendrons dans la suite, expliquent pourquoi les méthodes présentées dans cette thèse peuvent s’appliquer à d’autres types de transport.

7. nommée équation de transfert radiative [253].



## 1.3 Objectif et plan de la thèse

Au cours de cette thèse, nous avons développé une méthode générale permettant de construire, pour les structures CPP et CIP, des modèles de transport macroscopiques capturant des effets de libre parcours moyen à partir de l'équation de Boltzmann. En particulier, cette approche, qu'on nommera le modèle collisionnel, généralise la méthode des flux et restitue en particulier les modèles de transport bien connus comme le modèle dérive-diffusion, le modèle de Valet-Fert ou encore le modèle de Fuchs-Sondheimer ([148] à [160]) dans les limites appropriées. De plus, le modèle collisionnel unit les structures CPP et CIP sous un formalisme commun dans la mesure où les modèles macroscopiques sont dérivés à partir d'un jeu d'équations microscopiques unique qui tiennent compte des collisions d'interface. Notons cependant qu'étant basé sur l'équation de Boltzmann, notre approche est limitée au régime incohérent mais aussi au régime linéaire sur lequel nous avons concentré nos efforts.

La présentation de ce modèle est organisée en huit chapitres. Les quatre premiers (chapitre 2 à 5) sont consacrés au transport CPP, les chapitres 6 et 7 sont destinés aux structures CIP et le chapitre 8 fournit une synthèse de cette approche.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter la dérivation du modèle collisionnel pour le cas du transport pur de charge dans les structures CPP. Après quelques rappels sur le modèle dérive-diffusion, nous construirons les nouvelles équations de transport de volume du modèle collisionnel. Nous établirons ensuite les conditions d'interfaces associées aux équations de transport. Nous terminerons enfin par montrer, comment à partir de ce modèle, le modèle dérive-diffusion peut être restitué.

Le troisième chapitre sera consacré aux implications du modèle collisionnel pour le transport CPP. Nous introduirons une représentation du modèle en termes de potentiels électrochimiques et nous regarderons les corrections de libre parcours moyen sur la résistance d'un multicouche.

Dans le quatrième chapitre, nous présenterons, toujours pour les structures CPP, la polarisation en spin du modèle collisionnel. Nous fournirons en particulier l'extension du modèle macroscopique et comprendrons son lien avec le modèle Valet-Fert.

Ayant mentionné à plusieurs reprises que les travaux réalisés au cours de cette thèse étaient applicables à d'autres types de transport, nous montrerons dans le cinquième chapitre comment les idées du modèle collisionnel peuvent s'appliquer au transport de la lumière. Un modèle de transport lumineux sera développé. Nous revisiterons alors un vieux problème de transport, le problème de Milne que l'on résoudra à l'aide d'une approche macroscopique. Dans ce chapitre, nous reviendrons également sur la méthode des flux en montrant qu'elle constitue un cas particulier du modèle collisionnel.

Dans le sixième chapitre, nous appliquerons le modèle collisionnel au transport CIP. Nous verrons en particulier qu'il introduit de nouveaux paramètres

d'interface dont les effets sont apparents dans le régime de Knudsen. Les méthodes utilisées pour les structures CPP seront alors plus facilement transposables à ces systèmes. Nous montrerons que l'on peut dériver différents types de modèles macroscopiques pour cette géométrie.

Le septième chapitre est consacré à la présentation d'une méthode variationnelle pour le modèle de Fuchs-Sondheimer permettant de comprendre en particulier les origines du modèle collisionnel.

Dans le dernier chapitre, nous présentons une synthèse des principaux points du modèle collisionnel ainsi que quelques extensions possibles de ce travail.

## Chapitre 2

# Transport de charge en structure CPP

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction au transport CPP . . . . .</b>	<b>18</b>
<b>2.2</b>	<b>Le transport de volume : la chiralisation du transport . . . . .</b>	<b>26</b>
<b>2.3</b>	<b>Effets de bords et d'interface . . . . .</b>	<b>38</b>
<b>2.4</b>	<b>La limite dérive-diffusion . . . . .</b>	<b>46</b>
<b>2.5</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>53</b>
<b>2.6</b>	<b>Complément : formulations équivalentes des effets d'interface . . . . .</b>	<b>54</b>

---

Ce chapitre est consacré à l'étude du transport électrique en géométrie CPP. Nous allons développer un modèle de transport macroscopique, le modèle collisionnel, adapté au régime diffusif et incluant une description à la Landauer pour les effets d'interfaces. En particulier, ce nouveau modèle, toujours basé sur l'équation de Boltzmann, généralise le modèle dérive-diffusion bien connu, restitue les résultats du formalisme de Landauer dans le régime incohérent par une approche macroscopique et s'apparente à une méthode des flux généralisée.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les bases théoriques de cette nouvelle modélisation en nous concentrant sur le transport pur de charge, c'est à dire sans polarisation en spin du courant (un chapitre sera consacré à cette question). Très peu d'hypothèses seront faites dans ce chapitre afin de présenter une méthode générale permettant de passer de l'équation de Boltzmann à une approche macroscopique. En particulier, le modèle sera développé pour un gaz d'électrons dégénérés et les interactions entre électrons (effets d'écrantage) seront traitées en champ moyen et par une approche complètement semi-classique qui néglige donc les effets quantiques liés aux interactions. Il est clair que pour les métaux, ce traitement des interactions est très approximatif et doit être corrigé par une approche quantique<sup>1</sup>. Malgré cela, ce traitement semi-classique est conservé pour deux raisons : on souhaite comprendre toute l'information que

---

<sup>1</sup>. car l'extension spatiale des effets d'écrantage est de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi (comme nous le verrons dans la suite).

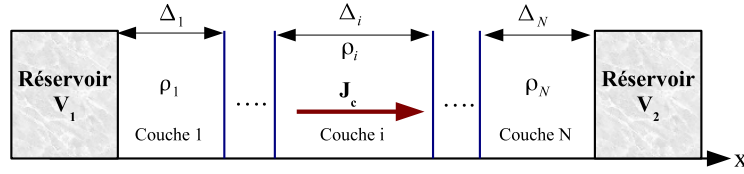


FIGURE 2.1 – Exemple de multicouche CPP. Chaque matériau possède une épaisseur ( $\Delta$ ) et une résistivité ( $\rho$ ) de volume différentes. La densité de courant de charge  $J_c$  circule perpendiculairement aux interfaces et traversent donc toutes les couches.

l'on peut tirer d'une approche classique du transport électronique et présenter une méthode générale qui peut être adaptée à d'autres types de problèmes pour lesquels les effets quantiques ne sont pas prépondérants.

Nous commencerons par introduire les caractéristiques du transport CPP et nous détaillerons le modèle dérive-diffusion afin de pouvoir replacer par la suite ce modèle au sein du modèle collisionnel. Ensuite, nous introduirons le concept de chiralité à la base de tout ce formalisme. Son application à l'équation de Boltzmann conduira alors à de nouvelles équations de transport. Nous passerons ensuite à la construction de nouvelles conditions d'interfaces en adoptant le point de vue de Landauer-Büttiker mais compatibles avec un transport de volume diffusif. Enfin, nous chercherons à comprendre le lien existant entre les modèles collisionnel et dérive-diffusion pour terminer par quelques compléments sur les conditions d'interfaces.

## 2.1 Introduction au transport CPP

### 2.1.1 La problématique

Dans ce chapitre, on souhaite comprendre les propriétés de transport électrique d'un assemblage (voir la figure 2.1) de différents matériaux de résistivités de volume  $\rho$  différentes parcouru par un courant continu. La configuration CPP oblige le courant à traverser toutes les couches et circule donc perpendiculairement aux interfaces. Pour ces systèmes, on fera l'hypothèse d'un transport unidimensionnel et ne dépendant que de la variable d'espace  $x$  (On suppose les couches infiniment épaisses dans les deux autres directions). On s'intéressera au régime stationnaire (courant continu).

Un multicouche est donc constitué de zones présentant des propriétés de volume différentes (résistivité, densité d'électrons, vitesse de Fermi,...) et séparées entre elles par des interfaces abruptes<sup>2</sup> marquant le changement des propriétés de volume. Cette hétérostructure est connectée à ses extrémités à deux réservoirs permettant soit d'imposer une différence de potentiel  $V_1 - V_2$  à ses bornes (voir la figure 2.1), soit d'injecter une densité de courant  $J_c$ .

2. Cette représentation est bien sur une idéalisation et suppose que l'épaisseur de la zone de transition est suffisamment faible pour être localisée en un point.

L'étude du transport électrique consiste donc, pour un jeu de conditions aux limites données (tension appliquée aux bornes du multicouche ou densité de courant imposée) à comprendre l'injection des électrons au niveau des réservoirs (les effets de bords), la propagation des électrons d'une interface à une autre (le transport de volume) ainsi que la traversée de chaque interface (les effets d'interface). Ces propriétés de transport vont dépendre de la nature des matériaux ainsi que des transparences des interfaces mais elles sont également dictées par certaines lois de conservation fondamentales. En particulier, indépendamment de la constitution du système, la conservation de la charge devra être vérifiée et le courant  $J_c$  doit donc satisfaire l'équation de continuité en régime stationnaire :

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_c = 0 \Rightarrow \frac{\partial J_x}{\partial x} = 0 \Rightarrow J_c = \text{constante} \quad (2.1)$$

qui implique que le courant doit être uniforme tout le long de la structure.

Pour qu'il en soit ainsi pour les structures CPP, il faut que la densité de charge soit également perturbée et présente une dépendance spatiale. Cette accumulation de charge induit un champ électrique vérifiant la seconde équation de Maxwell :

$$\nabla \mathbf{E} = \frac{\partial E}{\partial x} = \frac{n(x) - n_{eq}}{\epsilon} \quad (2.2)$$

où  $\epsilon$  est la constante diélectrique que nous supposons être la même pour toutes les couches.

On est donc en présence d'un problème auto-cohérent dans le sens où l'application d'une tension ou l'injection d'un courant perturbe la densité d'équilibre ( $n_{eq}$ ) générant alors un champ électrique induit qui agit à son tour sur les propriétés de transport. De plus, il faut noter qu'à l'équilibre aucun champ électrique ne circule au sein de la structure<sup>3</sup>, seul l'écart à la densité d'équilibre  $n(x) - n_{eq}$  (appelé aussi accumulation) est responsable du champ électrique induit d'où son apparition dans l'équation 2.2. On doit donc comprendre le transport sous l'action d'un champ électrique auto-cohérent avec la densité de charge (approximation de champ moyen).

On constate donc qu'en géométrie CPP, le champ électrique dépend de la position et ne peut donc être uniforme. Ceci entraîne que la conductivité  $\sigma$  n'est pas une quantité locale ([241], [245]) :

$$J_c = \int dx' \sigma(x, x') E(x') \quad (2.3)$$

Le transport est alors plus facilement caractérisé par la notion de résistivité  $\rho$  qui, à cause de l'uniformité du courant, est une grandeur locale :

$$E(x) = \int dx' \rho(x, x') J_c \Rightarrow E(x) = \rho(x) J_c \quad (2.4)$$

où on a posé  $\rho(x) = \int dx' \rho(x, x')$ .

---

3. A cause d'une réponse du champ cristallin.

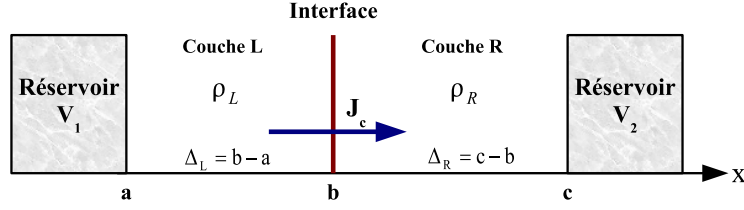


FIGURE 2.2 – Le bicouche CPP. Ce système modèle est composé de deux matériaux de résistivités  $\rho_L$  et  $\rho_R$  et d'épaisseurs  $\Delta_L$  et  $\Delta_R$  différentes. Ces deux matériaux sont séparés par une interface, positionnée en  $x = b$ , caractérisant le changement des propriétés de volume. Les deux matériaux sont connectés à deux réservoirs situés en  $x = a$  et  $x = b$ .

Ainsi, pour étudier le transport en configuration CPP, il faut déterminer le profil de densité ainsi que la résistivité électrique locale pour chaque matériau du multicouche. Un système simple qu'on utilisera dans la suite pour construire notre modèle est celui constitué de deux matériaux d'épaisseurs et résistivités différentes séparées par une interface (voir la figure 2.2). Grâce à ce système modèle, toutes les notions seront introduites et facilement généralisables à un multicouche quelconque.

### 2.1.2 L'équation de Boltzmann CPP

Pour décrire le transport de volume, nous adopterons l'équation de Boltzmann ([250], [249], [251] ou [252]) avec une intégrale de collision élastique (qui n'affecte que la direction du vecteur vitesse) et isotrope :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)) \quad (2.5)$$

Dans cette équation,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  désigne la fonction de distribution,  $\mathbf{r}$  le vecteur position et  $\mathbf{v}$  la vitesse. Les collisions sont caractérisées par le taux de collision isotrope  $\frac{1}{\tau}$ . Dans le transport CPP, la fonction de distribution évolue sous l'action d'une force électrique dirigée suivant l'axe  $x$  :

$$\mathbf{F} = -eE(x)\mathbf{e}_x \quad (2.6)$$

où  $-e$  désigne la charge électrique de l'électron et  $E(x)$  le champ électrique. Ce champ dérive d'un potentiel électrique  $V(x)$  :

$$E(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (2.7)$$

Ainsi, dans le cadre du transport CPP, la fonction de distribution ne dépendra de l'espace que par l'intermédiaire de la coordonnée  $x$  et sera indépendante du temps. Ainsi, l'équation de Boltzmann précédente prend la forme utile pour la suite :

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} + ev_x \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \epsilon_c} = -\frac{f}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f(x, \mathbf{v}', t) \quad (2.8)$$

dans laquelle on a introduit l'énergie cinétique  $\epsilon_c = \frac{1}{2}mv^2$ . Le vecteur vitesse  $\mathbf{v}$  sera paramétré sous la forme :

$$v_x = v \cos \theta \quad v_z = v \sin \theta \cos \varphi \quad v_y = v \sin \theta \sin \varphi \quad (2.9)$$

où  $v$  est la norme de la vitesse. On posera  $\ell = v\tau$  le libre parcours moyen. L'angle solide  $d\Omega$  intervenant dans l'intégrale de collision s'écrit donc :

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \quad (2.10)$$

et les angles  $\theta$  et  $\varphi$  parcourent respectivement les intervalles  $[0, \pi]$  et  $[0, 2\pi]$ .

En utilisant l'équation 2.2, le potentiel électrique satisfait l'équation de Poisson ([241]) :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{n_{eq} - n(x)}{\epsilon} \quad (2.11)$$

Dans la suite, il sera commode d'introduire le potentiel adimensionné  $\bar{V}$  :

$$\bar{V}(x) = \frac{V(x)}{V_0} \quad V_0 = \frac{\epsilon_f}{e} \quad (2.12)$$

A partir de la fonction de distribution, les grandeurs macroscopiques que sont la densité de charge  $n$  et la densité de courant de charge  $J_c$  sont déterminées par les relations :

$$n(x) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} f(x, \mathbf{v}) \quad (2.13)$$

$$J_c = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} v_x f(x, \mathbf{v}) \quad (2.14)$$

A l'équilibre thermodynamique, la fonction de distribution sera notée  $f_0$  et on supposera qu'elle correspond à celle de Fermi-Dirac à température nulle :

$$f_0(\epsilon_c) = \theta(\epsilon_f - \epsilon_c) \quad (2.15)$$

quelle que soit la couche du multicouche, où  $\epsilon_f = \frac{1}{2}mv_f^2$  est l'énergie de Fermi. Cette hypothèse suppose donc des propriétés uniformes en l'absence de transport. En particulier, la densité d'électrons d'équilibre est donnée par la relation :

$$n_0 = \frac{8\pi m^3 v_f^3}{3h^3} \quad (2.16)$$

et la densité de charge d'équilibre,  $n_{eq}$ , intervenant dans l'équation de Poisson s'écrit donc :

$$n_{eq} = -en_0 \quad (2.17)$$

Ainsi, pour comprendre le transport dans les structures CPP, il faut savoir résoudre les équations couplées 2.8 et 2.11 afin de déterminer les grandeurs macroscopiques 2.13 et 2.14. En particulier, s'intéressant au régime linéaire du transport ( $E(x) = \rho(x)J_c$ ), on linéarise ces équations autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique pour les résoudre.

Remarque : pour éviter d'introduire trop de notation, l'accumulation de charge  $n(x) - n_{eq}$  sera également notée  $n(x)$  dans la suite. Dès lors que les équations seront linéarisées, il n'y aura plus d'ambiguïté sur la signification de cette quantité.

### 2.1.3 Le modèle Dérive-Diffusion

Pour mieux comprendre le développement du modèle collisionnel, nous allons dans ce paragraphe détailler la dérivation du modèle dérive-diffusion bien connu ([1], [246], [249], [251], [252]) à partir de l'équation de Boltzmann. Ceci nous permettra de présenter la méthode usuelle de résolution des équations introduites au paragraphe précédent et de mieux comprendre les modifications que l'on va apporter à cette méthode lors de la dérivation du modèle collisionnel.

Pour résoudre les équations 2.8 et 2.11 dans le régime linéaire, la fonction de distribution est décomposée sous la forme :

$$f(x, \mathbf{v}) = f_0 + \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_c} g(x, \theta) \quad (2.18)$$

et la linéarisation de l'équation 2.8 fournit une équation pour la partie hors-équilibre  $g$  de la fonction de distribution :

$$\cos \theta \frac{\partial g}{\partial X} + \cos \theta \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} = -g + \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta g(X, \theta) \quad (2.19)$$

où on a introduit la variable sans dimension  $X = \frac{x}{\ell}$ .

La technique usuelle consiste alors à décomposer la fonction  $g$  sur la base des polynômes de Legendre  $P_\ell$  :

$$g(X, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} g_\ell(X) P_\ell(\cos \theta) \quad (2.20)$$

afin de transformer l'équation intégral-différentielle 2.19 en équations différentielles couplées pour les composantes  $g_\ell$  grâce à l'orthogonalité des polynômes de Legendre :

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) = \frac{2}{(2\ell + 1)} \delta_{\ell, \ell'} \quad (2.21)$$

La projection de l'équation 2.19 est présentée en annexe A.1 et conduit aux équations entre composantes :

$$\frac{\partial g_1}{\partial X} = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial g_0}{\partial X} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} + \frac{2}{5} \frac{\partial g_2}{\partial X} = -g_1 \quad (2.23)$$

$$\frac{n}{(2n-1)} \frac{\partial g_{n-1}}{\partial X} + \frac{(n+1)}{(2n+3)} \frac{\partial g_{n+1}}{\partial X} = -g_n \quad \forall n \geq 2 \quad (2.24)$$

On obtient alors un ensemble infini d'équations différentielles couplées. Pour rendre ce système utilisable, on peut remarquer que les grandeurs macroscopiques d'intérêt (l'accumulation  $n$  et le courant  $J_c$ ) sont fournies par la connaissance des composantes  $g_0$  et  $g_1$  de la fonction de distribution  $g$  :

$$n(x) = -2e \left( \frac{m}{h} \right) \int d\mathbf{v} \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} g(x, \theta) = \frac{3}{2} n_0 e g_0 \quad (2.25)$$



$$J_c = -2e \left( \frac{m}{h} \right) \int d\mathbf{v} v_x \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} g(x, \theta) = \frac{1}{2} n_0 e v_f g_1 \quad (2.26)$$

Il est alors naturel de tronquer les équations 2.22 à 2.24 à partir de l'ordre un, c'est à dire en négligeant tous les ordres supérieurs ou égaux à deux. Cette troncature conduit alors au **modèle Dérive-Diffusion** bien connu :

$$\frac{\partial J_c}{\partial x} = 0 \quad (2.27)$$

$$J_c = \sigma_d E - D \frac{\partial n}{\partial x} \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{n}{\epsilon} \quad E = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (2.29)$$

où  $\sigma_d = \frac{e^2 n_0 \tau}{m}$  est la conductivité de Drude et  $D = \frac{v_f \ell}{3}$  est la constante de diffusion.

On obtient alors des équations régissant directement les variations spatiales des grandeurs macroscopiques dont on remarque que la première n'est rien d'autre que l'équation de continuité présentée en introduction. La seconde équation lie le courant à la densité en combinant une loi d'Ohm locale  $\sigma_d E(x)$  avec la loi de Fick  $-D \partial_x n$  ([249]). La dernière équation n'étant que l'équation de Poisson que nous avons remplacée ici afin de compléter et fermer les équations obtenues par la solution tronquée de l'équation de Boltzmann.

La combinaison de ces équations conduit à une équation de diffusion pour la densité :

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda_{TF}^2} n = 0 \quad (2.30)$$

où on a introduit

$$\lambda_{TF}^2 = \frac{\epsilon D}{\sigma_d} = \frac{2\epsilon\epsilon_f}{3e^2 n_0} \quad (2.31)$$

la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi ([244]). En résolvant ces équations, on obtient alors l'expression des grandeurs moyennes qu'on écrira sous la forme utile pour la suite :

$$n(x) = -\frac{3J_c}{v_f} \left[ \delta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \delta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.32)$$

$$E(x) = \frac{J_c}{\sigma_d} \left[ 1 + \eta \left( \delta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \delta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right) \right] \quad (2.33)$$

$$V(x) = \frac{J_c \ell}{\sigma_d} \left[ \delta_3 - \frac{x}{\ell} + \delta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \delta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.34)$$

où l'on a introduit le rapport :

$$\eta = \frac{\ell}{\lambda_{TF}} \quad (2.35)$$

et on remarquera que seul le libre parcours moyen à l'énergie de Fermi n'est pertinent dans ces équations  $\ell = \tau v_f$ . On constate que ces expressions ne font inter-

venir qu'une longueur de décroissance spatiale, la longueur d'écran de Thomas-Fermi. Les constantes d'intégration  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  et  $\delta_3$  sont alors déterminées par les conditions aux limites.

Etant donnée l'expression 2.28 du courant, on constate que celui-ci dérive d'un potentiel, nommé potentiel électrochimique ([60],[249]) et noté  $\bar{\mu}$  :

$$J_c = -\sigma_d \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial x} \quad (2.36)$$

défini par :

$$\bar{\mu}(x) = V(x) + \frac{D}{\sigma_d} n(x) \quad (2.37)$$

Compte tenu des expressions des profils d'accumulation 2.32 et du potentiel électrique 2.34, on en déduit que ce potentiel s'écrit sous la forme :

$$\bar{\mu}(x) = \frac{J_c \ell}{\sigma_d} \left[ \delta_3 - \frac{x}{\ell} \right] \quad (2.38)$$

qui est bien compatible avec une densité de courant uniforme. Ce dernier point clôt ainsi la présentation du modèle Dérive-diffusion.

Remarque : Pour un métal, la longueur d'écran de Thomas-Fermi 2.31 vaut environ 0.1 nm ce qui est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Thomas-Fermi. La physique prédite à cette échelle doit être corrigée par une approche quantique (aussi bien pour le modèle dérive-diffusion que le modèle développé dans cette thèse). Cette petitesse de la longueur d'écran résulte du traitement de champ moyen des interactions que nous avons adopté qui surestime les effets d'écrantage.

#### 2.1.4 Pourquoi aller au delà du modèle dérive-diffusion

A première vue, le modèle dérive-diffusion peut être utilisé pour étudier le transport dans les multicouches puisqu'il fournit des expressions pour les grandeurs macroscopiques d'intérêt. Cependant, pour que ces profils soient univoquement déterminés, faut-il encore fixer les trois constantes d'intégration pour chacune des couches. Ceci ne peut se faire qu'en précisant les conditions de raccords aux interfaces et aux réservoirs. Mais qu'elles conditions imposer ?

Une condition de raccord fondamentale est celle de la continuité du courant  $J_c$ . Cependant, étant donné la forme des expressions 2.32, 2.33 et 2.34 des valeurs moyennes, on constate que cette contrainte est automatiquement satisfaite puisqu'il suffit d'adopter la même valeur de  $J_c$  pour les solutions de chaque couche. Cette condition n'apporte donc rien de plus.

Pour déterminer ces conditions, il peut être utile de s'adresser à d'autres théories. En particulier, ayant à disposition deux grandeurs électriques, le champ  $E$  et le potentiel  $V$ , l'électromagnétisme nous fournit alors les conditions de raccord pour ces quantités ([241]). Cette théorie fondamentale requiert la continuité du potentiel électrique et montre que la composante normale du champ électrique (qui est la seule composante en CPP) subit un saut au passage d'une interface

lié à la charge électrique surfacique  $\sigma_s$  propre à celle-ci. En adoptant le cas du bicouche (figure 2.2), ces conditions se traduisent sous la forme :

$$V_L = V_R \quad (2.39)$$

$$E_R - E_L = \frac{\sigma_s}{\epsilon} \quad (2.40)$$

Concernant la continuité du potentiel électrique, on constate que cette condition peut toujours être satisfaite puisque le potentiel électrique est toujours défini à une constante additive près ([241]). Ceci est immédiat en observant l'expression 2.34 où l'on constate que la constante  $\delta_3$  intervient seulement dans l'expression du potentiel et n'affecte aucunement les autres quantités. Ainsi, grâce à cette jauge, on peut toujours rendre le potentiel continu indépendamment de l'expression des autres constantes.

Une équation intéressante est celle correspondant au saut du champ électrique. Il faut noter que cette discontinuité n'est pas liée au saut d'accumulation de charge à l'interface. Dimensionnellement, la différence est immédiate car  $\sigma_s$  s'exprime en  $C.m^{-2}$  alors que l'accumulation en  $C.m^{-3}$ . En fait, la quantité  $\sigma_s$  décrit des électrons localisés sur l'interface, ils sont piégés et lui donne une charge surfacique globale non nulle. En ce qui nous concerne, on supposera que les interfaces ne piègent aucun électrons et donc que  $\sigma_s$  est nulle. Par conséquent, la condition de saut de champ électrique devient une condition de continuité pour celui-ci :

$$E_R = E_L \quad (2.41)$$

Cette équation constitue la première équation de raccordement aux interfaces utile et assure en particulier la continuité de la résistivité électrique  $\rho(x)$ .

Pour compléter cette équation, la seule possibilité est d'imposer une contrainte sur l'accumulation de charge. Cependant, si l'on se réfère à d'autres théories comme l'hydrodynamique ([242],[243]), on s'aperçoit que la densité n'est jamais une variable utile pour imposer une condition de raccordement, on peut simplement affirmer que cette quantité est la plupart du temps discontinue et que cette discontinuité est déterminée après coup, en appliquant des conditions de raccords sur d'autres quantités (typiquement des flux : courant, pression,...). Il semble donc naturel d'imposer un saut d'accumulation à l'interface mais comment quantifier ce saut. Il est clair qu'il dépend de la physique se déroulant à l'interface et que plus celle-ci est transparente aux électrons moins le saut d'accumulation est important. Toutefois, il n'est pas simple de poser une condition de raccord suffisamment rigoureuse permettant l'introduction de paramètres caractéristiques de l'interface pour définir clairement le saut d'accumulation.

Notons enfin que les conditions de connexion aux réservoirs ne sont pas simples à imposer car aux bords du système, on impose généralement la statistique des électrons injectés dans le multicouche. Hors, pour faire une telle chose, il faut pouvoir distinguer les électrons entrants et sortants du multicouche, chose qui n'est pas immédiat à partir du modèle dérive-diffusion.

Pour s'en sortir, il faut changer de point de vue et une approche à la Landauer-Büttiker ([8], [11], [12], [13], [246], [247], [248]) s'avère plus adaptée

pour imposer des conditions de raccordements. En effet, nous voyons que pour fixer correctement les conditions de raccord aux réservoirs, il faut naturellement adopter une approche distinguant les électrons se propageant vers la droite de ceux se dirigeant vers la gauche. On constate alors que cette séparation est également adaptée pour décrire les effets d'interfaces puisque par analogie avec le formalisme de Landauer, une interface constitue une zone de diffusion et les électrons arrivent et quittent cette zone en subissant des collisions affectant leur vitesse. Ainsi, pour pouvoir décrire un transport diffusif avec effets d'interfaces, il faudrait être en mesure de pouvoir combiner le formalisme de Landauer avec le modèle dérive-diffusion.

Dans ce chapitre, nous allons développer un modèle de transport adapté à un transport de volume collisionnel et permettant de définir l'équivalent de la matrice de scattering ([247], [248]) du formalisme de Landauer pour décrire les effets d'interfaces. La séparation en électrons droits et gauches conduit alors à de nouvelles équations de transport de volume généralisant le modèle dérive-diffusion et fusionnant ainsi les aspects balistiques et diffusifs du transport sous un même formalisme.

## 2.2 Le transport de volume : la chiralisation du transport

Comme introduit dans la présentation de la problématique, pour comprendre le transport dans une structure CPP, il faut comprendre le transport en volume de chaque couche ainsi que le passage aux interfaces. Dans cette section, on développe le transport en volume des couches et on introduira le concept d'électrons chiraux, clef de voûte de la nouvelle modélisation.

### 2.2.1 Chiralisation de l'équation de Boltzmann

Le modèle dérive-diffusion a été déduit en partant de l'équation de Boltzmann 2.8. Cette équation décrit l'évolution de la fonction de distribution totale du gaz d'électrons, dans le sens où elle caractérise tous types d'électrons quelques soient les caractéristiques du vecteur vitesse. Pour séparer les électrons se dirigeant vers la droite de ceux se propageant vers la gauche (voir la figure 2.3), la fonction de distribution doit donc être scindée en deux, une par chiralité. On parlera alors d'électrons chiraux.

Ainsi, un électron se dirigeant vers la droite à une composante  $v_x$  de la vitesse positive et la fonction de distribution associée sera notée  $f^+$ . Un électron se propageant vers la gauche à une composante  $v_x$  de sa vitesse négative. Cette composante sera alors notée  $-v_x$  de sorte que  $v_x$  désigne une quantité toujours positive et la fonction de distribution associée sera notée  $f^-$ . Il faut noter que cette séparation en chiralité n'est pas purement  $1D$  puisque les autres composantes de la vitesse  $v_y$  et  $v_z$  sont toujours présentes et laissées libres, c'est une séparation statistique (figure 2.3).

La composante  $v_x$  de la vitesse étant paramétrée par  $v_x = v \cos \theta$ , on constate à présent que l'angle  $\theta$  appartient à l'intervalle  $[0, \frac{\pi}{2}]$  et plus  $[0, \pi]$  puisque c'est une quantité toujours positive.

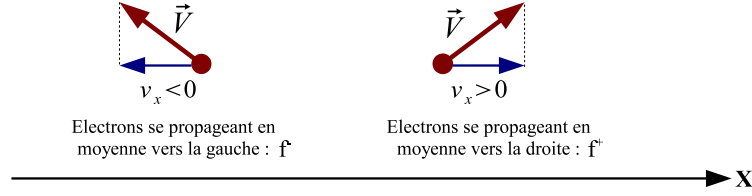


FIGURE 2.3 – Schématisation de la séparation en électrons chiraux. Les électrons se dirigeant vers la gauche sont caractérisés par la fonction de distribution  $f^-$  et ceux se propageant vers la droite par  $f^+$ . Cette séparation est statistique puisque le vecteur vitesse peut être orienté dans une direction quelconque, la séparation ne s'effectuant que vis-à-vis du signe de sa composante  $v_x$  qui est toujours dirigée soit vers la gauche, soit vers la droite.

Avec cette séparation, l'équation de Boltzmann 2.8 s'écrit en termes des chiralités sous la forme :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial f^\pm}{\partial x} \pm e \cos \theta \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f^\pm}{\partial \epsilon_c} = -\frac{f^\pm}{\ell} + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' (f^+(x, \theta') + f^-(x, \theta')) \quad (2.42)$$

et constitue donc l'équation de Boltzmann chirale. Ces équations peuvent être déduites en effectuant un bilan de particules dans l'espace des phases en tenant compte des différentes chiralités. Nous verrons par la suite qu'il existe une méthode systématique permettant de passer continûment de l'équation de Boltzmann 2.8 aux équations 2.42. Nous obtenons maintenant deux équations de Boltzmann couplées par l'intermédiaire de l'intégrale de collision.

Comme dans le cadre du modèle dérive-diffusion, on résout cette équation en la linéarisant autour de l'état d'équilibre 2.15 qui est le même pour chaque chiralité puisque la fonction est isotrope en vitesse. On pose donc :

$$f^\pm(X, \theta) = f_0 + \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_c} g^\pm(X, \theta) \quad (2.43)$$

qui conduit aux équations linéarisées :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial g^\pm}{\partial X} \pm \cos \theta \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} = -g^\pm + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' (g^+(X, \theta') + g^-(X, \theta')) \quad (2.44)$$

où on a introduit la variable sans dimension  $X = \frac{x}{\ell}$  et le potentiel électrique adimensionné 2.12.

A partir des composantes hors-équilibre  $g^+$  et  $g^-$  des fonctions de distribution, le profil d'accumulation de charge  $n(x)$  et le courant de charge  $J_c$  sont alors donnés par :

$$n(x) = \frac{3}{4} e n_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [g^+(X, \theta) + g^-(X, \theta)] \quad (2.45)$$

$$J_c = \frac{3}{4} en_0 v_f \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [g^+(X, \theta) - g^-(X, \theta)] \quad (2.46)$$

Les équations de Boltzmann 2.44 sont couplées à l'équation de Poisson 2.11 qui prend donc la forme :

$$\frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x^2} = -\frac{\eta^2}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta (g^+(X, \theta) + g^-(X, \theta)) \quad (2.47)$$

### 2.2.2 Base de polynômes

Pour résoudre les équations couplées 2.44 et 2.47, nous allons décomposer les parties  $g^+$  et  $g^-$  de la fonction de distribution sur une base de polynômes orthogonaux autre que les polynômes de Legendre utilisés pour l'obtention du modèle dérive-diffusion. Le choix de la base est argumenté dans ce paragraphe.

Pour définir une base de polynômes orthogonaux  $P_n$ , il faut se fixer un intervalle  $[a, b]$  de définition et un poids d'orthogonalité  $W$  pour lequel les polynômes seront orthogonaux. Dans ce cas, les polynômes satisfont la règle d'orthogonalité :

$$\int_a^b dx W(x) P_n(x) P_m(x) = \|P_n\|^2 \delta_{m,n} \quad (2.48)$$

où  $\|P_n\|$  désigne la norme de  $P_n$ . On dit alors que la famille de polynômes  $P_n$  est orthogonale pour le poids  $W$  sur l'intervalle  $[a, b]$ .

L'intérêt de telles familles est qu'elles constituent des bases de l'espace de Hilbert. Ainsi, toute fonction  $h$  définie sur l'intervalle  $[a, b]$  peut être développée sur la base des polynômes orthogonaux :

$$h(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} h_n P_n(x) \quad (2.49)$$

l'ensemble  $\{h_n\}$  constitue les composantes de la fonction  $h$  sur la base  $P_n$  et s'obtient par projection orthogonale de la fonction  $h$  sur les polynômes :

$$h_n = \frac{1}{\|P_n\|^2} \int_a^b dx W(x) h(x) P_n(x) \quad (2.50)$$

L'exemple le plus connu est celui des polynômes de Legendre  $P_\ell$  orthogonaux sur l'intervalle  $[-1, 1]$  pour le poids  $W = 1$  :

$$\int_{-1}^1 dx P_\ell(x) P_{\ell'}(x) = \frac{2}{(2\ell + 1)} \delta_{\ell, \ell'} \quad (2.51)$$

$$P_0 = 1 \quad P_1 = x \quad P_{\ell+1} = \frac{(2\ell + 1)}{(\ell + 1)} P_\ell - \frac{\ell}{(\ell + 1)} P_{\ell-1} \quad (2.52)$$

Lorsqu'on effectue le changement de variable  $x = \cos \theta$ , les polynômes de Legendre deviennent alors orthogonaux sur l'intervalle  $[0, \pi]$  pour le poids  $W = \sin \theta$  et le choix de cette base lors de la dérivation du modèle dérive-diffusion s'explique comme suit. Dans l'équation de Boltzmann 2.19, on remarque que l'intégrale de collision fait apparaître le poids et l'intervalle d'orthogonalité des

polynômes de Legendre. De même, le calcul des valeurs moyennes fait également apparaître ce poids et cet intervalle particulier. De plus,  $\cos \theta$  s'exprime simplement sur la base des polynômes de Legendre puisqu'il vaut identiquement  $P_1(\cos \theta)$ . Toutes ces propriétés font que les polynômes de Legendre constituent le choix le plus pertinent de base de projection de la fonction de distribution pour l'équation de Boltzmann 2.19.

En présence des chiralités, les choses sont un peu différentes puisqu'on remarque que les intégrales de collisions dans les équations de Boltzmann 2.44 et le calcul des valeurs moyennes 2.45 et 2.46 font toujours intervenir le poids d'intégration  $\sin \theta$  mais sur l'intervalle  $[0, \frac{\pi}{2}]$  et non  $[0, \pi]$ . Il faut donc utiliser des polynômes orthogonaux sur l'intervalle  $[0, \frac{\pi}{2}]$  pour le poids  $\sin \theta$ . Ces polynômes qui ont été redécouverts au cours de cette thèse étaient connus depuis longtemps en mathématiques sous le nom de Polynôme de Legendre décalé, qu'on notera  $\bar{P}_n$ . Dans notre jargon, on parlera aussi de polynômes chiraux. Il se déduisent des polynômes de Legendre ordinaires par la formule de décalage :

$$\bar{P}_n(x) = P_n(2x - 1) \quad (2.53)$$

Ces polynômes satisfont alors la relation d'orthogonalité :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_n \bar{P}_m = \frac{\delta_{n,m}}{(2n+1)} \quad (2.54)$$

et sont construits par la relation de récurrence :

$$\bar{P}_0 = 1 \quad \bar{P}_1 = 2 \cos \theta - 1 \quad \bar{P}_{\ell+1} = \frac{(2\ell+1)}{(\ell+1)} \bar{P}_1 \bar{P}_\ell - \frac{\ell}{(\ell+1)} \bar{P}_{\ell-1} \quad (2.55)$$

On constate alors que  $\cos \theta$  s'exprime aussi simplement sur cette base puisque :

$$\cos \theta = \frac{1}{2} (\bar{P}_1(\cos \theta) + \bar{P}_0) \quad (2.56)$$

Par conséquent, les fonctions de distribution  $g^\pm$  seront décomposées sur la base des polynômes chiraux :

$$g^\pm(X, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm(X) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (2.57)$$

Cette longue argumentation du choix de la base de projection s'explique pas le fait que si dans la littérature la séparation de la fonction de distribution en chiralité est une chose connue de longue date, que se soit le transport électrique ([11], [12], [248], [29] à [37], [38] à [42], [24] à [28]), lumineux ([178] à [183]) ou thermique ([208] à [211]), la projection reste toujours un point délicat et la résolution de l'équation de Boltzmann chirale passe alors par l'utilisation d'Ansatz ou de méthode numérique. On peut trouver dans certains articles une projection sur les polynômes de Legendre ordinaires qui conduit alors à des équations bien compliquées qui rendent les choses plus difficiles qu'elles ne le sont. En fait, tout le travail de cette thèse repose sur l'utilisation de ces polynômes chiraux qui ont facilité et rendu possible tous les développements réalisés.

### 2.2.3 Grandeurs macroscopiques chirales

Compte tenu de la décomposition 2.57 des parties hors-équilibre de la fonction de distribution, on peut alors relier les valeurs moyennes 2.45 et 2.46 aux composantes  $g_n^\pm$  des fonctions  $g^\pm$ . Ceci nous permettra alors d'introduire un certain nombre de grandeurs macroscopiques chirales utiles pour la suite.

#### Accumulation de charge

A partir de l'expression 2.45, on constate que l'accumulation de charge est liée aux composantes d'ordre zéro des fonctions de distribution :

$$n(x) = \frac{3}{4}en_0(g_0^+(x) + g_0^-(x)) \quad (2.58)$$

On introduit alors les accumulations de charge par chiralité :

$$n^\pm(x) = \frac{3}{4}en_0g_0^\pm(x) \quad n(x) = n^+(x) + n^-(x) \quad (2.59)$$

et on définit la différence des accumulations par chiralité (qui est aussi la différence des densités de charge par chiralité) :

$$\delta n(x) = n^+(x) - n^-(x) = \frac{3}{4}en_0(g_0^+(x) - g_0^-(x)) \quad (2.60)$$

#### Profil de courant

Compte tenu de l'expression 2.46, la densité de courant de charge fait intervenir les composantes d'ordre zéro et un des fonctions de distribution et s'écrit :

$$J_c = \frac{3}{4}en_0v_f \left( \frac{1}{6}(g_1^+ - g_1^-) + \frac{1}{2}(g_0^+ - g_0^-) \right) \quad (2.61)$$

Comme pour l'accumulation, on introduit des profils de courant par chiralité

$$J^\pm(x) = \pm \frac{3}{4}en_0v_f \left( \frac{1}{6}g_1^\pm(x) + \frac{1}{2}g_0^\pm(x) \right) \quad (2.62)$$

Ces courants chiraux seront scindés en deux contributions :

$$J_0^\pm(x) = \pm \frac{3}{8}en_0v_f g_0^\pm(x) = \pm \frac{v_f}{2}n^\pm(x) \quad J_1^\pm(x) = \pm \frac{1}{8}en_0v_f g_1^\pm(x) \quad (2.63)$$

où  $J_0^\pm$  et  $J_1^\pm$  seront appelés respectivement composantes isotrope et anisotrope du courant pour la raison que la composante  $J_0^\pm$  est liée à l'accumulation de charge chirale  $n^\pm$  et donc à la composante isotrope (indépendante de l'angle  $\theta$ ) de la fonction de distribution. La composante anisotrope  $J_1^\pm$  est liée à une dépendance angulaire d'ordre supérieure (composante d'ordre un de la fonction de distribution) et est générée par les collisions. En fait, dans un régime de transport purement balistique ( $\ell = \infty$ ) seule les composantes  $J_0^\pm$  existent et la présence des composantes  $J_1^\pm$  (même dans une zone balistique) signifie qu'il existe quelque part un libre parcours moyen fini.



De ces définitions, on remarque que les différents courants peuvent s'écrire :

$$J^+(x) = J_0^+(x) + J_1^+(x) = \frac{v_f}{2}n^+(x) + J_1^+(x) \quad (2.64)$$

$$J^-(x) = J_0^-(x) + J_1^-(x) = -\frac{v_f}{2}n^+(x) + J_1^-(x) \quad (2.65)$$

$$J_c = J^+(x) + J^-(x) = \frac{v_f}{2}\delta n(x) + J_1^+(x) + J_1^-(x) \quad (2.66)$$

L'existence de ces deux types de courant (isotrope et anisotrope) constitue une nouveauté par rapport à ce que l'on trouve dans la littérature ([29] à [37], [38] à [42], [25] et [26]) puisque dans ces modèles, la séparation en courants chiraux  $J^+$  et  $J^-$  est toujours associée à un courant purement isotrope ne s'écrivant qu'en fonction des densités chirales  $n^\pm$ . L'aspect courant anisotrope n'est pas pris en compte dans ces différentes approches.

On définit enfin la différence des courants, qui s'apparente à une polarisation, qu'on notera  $J_p$ , donnée par la relation :

$$J_p(x) = J^+(x) - J^-(x) = \frac{3}{4}en_0v_f \left( \frac{1}{6}(g_1^+(x) + g_1^-(x)) + \frac{1}{2}(g_0^+(x) + g_0^-(x)) \right) \quad (2.67)$$

On constate à nouveau que pour étudier le transport, seul les composantes d'ordre zéro et un suffisent à déterminer toutes les grandeurs macroscopiques d'intérêt comme dans le cadre du modèle dérive-diffusion.

Remarque : Il est intéressant de noter qu'en terme des chiralités, l'état d'équilibre n'est pas un état figé. En effet, à l'équilibre, les courants associés à chaque chiralité ne sont pas nuls bien que le courant de charge total le soit :

$$J_{eq}^+ = -\frac{3e}{16}n_0v_f \quad J_{eq}^- = \frac{3e}{16}n_0v_f \Rightarrow J_c = J_{eq}^+ + J_{eq}^- = 0 \quad (2.68)$$

Il existe donc des flux de particules qui se compensent strictement et on remarquera que ces courants sont purement isotropes puisque la fonction de distribution ne possède qu'une composante d'ordre zéro sur les polynômes chiraux. Par ailleurs, les densités d'électrons par chiralité sont simplement données par :

$$n_{eq}^\pm = -\frac{en_0}{2} \quad n_{eq}^+ + n_{eq}^- = n_{eq} = -en_0 \quad (2.69)$$

Ces différentes contributions d'équilibre ne joueront aucun rôle dans la suite.

### 2.2.4 Equations de transport

Etant donné que seuls les deux premières composantes des développements 2.57 suffisent à comprendre le transport, nous allons résoudre, comme pour le modèle dérive-diffusion, les équations couplées 2.44 et 2.47 en utilisant une projection tronquée à partir de l'ordre un. La projection des équations est présentée en annexe A.2. Cette projection conduit alors à des équations de transport (équivalentes des équations 2.27 à 2.29) que nous présentons maintenant. Il faut noter que si les équations de transport du modèle dérive-diffusion ont une forme unique, les équations de transport issues de la décomposition chirale peuvent

prendre différentes formes qu'on appellera représentations puisque le nombre de quantités macroscopiques est plus important que celui du modèle dérive-diffusion.

Pour écrire ces équations, on rappelle les expressions de la conductivité de Drude ( $\sigma_d$ ) et de la constante de diffusion ( $D$ ) :

$$\sigma_d = \frac{e^2 n_0 \ell}{m v_f} \quad D = \frac{v_f \ell}{3} \quad (2.70)$$

avec  $\ell = v_f \tau$ .  $\epsilon$  désignera la constante diélectrique.

### La représentation chirale $n^\pm$ et $J_1^\pm$

Cette représentation consiste à écrire les équations de transports en termes des accumulations chirales  $n^\pm$  et des composantes anisotropes du courant  $J_1^\pm$  qui permettent de calculer tous types de grandeurs macroscopiques.

$$\frac{\partial n^+}{\partial x} + \frac{\sigma_d}{2D} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{(n^- - n^+)}{\ell} + \frac{2}{D} J_1^+ \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial n^-}{\partial x} + \frac{\sigma_d}{2D} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{(n^- - n^+)}{\ell} + \frac{2}{D} J_1^- \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial J_1^+}{\partial x} + \frac{3}{\ell} J_1^+ = \frac{n^+ - n^-}{4\tau} \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial J_1^-}{\partial x} - \frac{3}{\ell} J_1^- = \frac{n^- - n^+}{4\tau} \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{(n^+ + n^-)}{\epsilon} \quad (2.75)$$

Il est intéressant de remarquer qu'en négligeant les courants anisotropes, ces équations ont la forme donnée<sup>4</sup> par la méthode des flux développée initialement par McKelvey et Al ([29] à [37]) et reprise par Lundstrom ([38] à [42]).

De ces équations, on remarquera la relation

$$\frac{D}{2} \frac{\partial \delta n}{\partial x} = J_1^+ - J_1^- \quad (2.76)$$

qui montre qu'un gradient de courant isotrope génère, dans un régime diffusif, une différence de composantes anisotropes du courant. Ces équations décrivent en fait des conversions de courants isotropes en courants anisotropes et réciproquement puisque les accumulations  $n^\pm$  ne sont rien d'autre que les composantes isotropes du courant. On remarquera que la composante anisotrope du courant agit comme terme source pour la composante isotrope de même chiralité alors que les deux composantes chirales des courants anisotropes agissent ensemble sur chaque chiralité des composantes anisotropes. Cette asymétrie provient de l'isotropie de l'intégrale de collision qui ne couple la fonction de

4. Chose que nous verrons au chapitre 5.

distribution qu'à son premier moment.

La conservation du courant est bien assurée puisque l'équation 2.76 et la combinaison des équations 2.73 et 2.74 conduisent à :

$$\begin{cases} \partial_x (J_0^+ + J_0^-) = \frac{3}{\ell} (J_1^+ - J_1^-) \\ \partial_x (J_0^+ - J_0^-) = -\frac{3}{\ell} (J_1^+ - J_1^-) \end{cases} \Rightarrow \partial_x (J_0^+ + J_0^-) + \partial_x (J_1^+ + J_1^-) = \partial_x J_c = 0 \quad (2.77)$$

On notera enfin que la quantité  $J_1^+ - J_1^-$  vérifie l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial^2 (J_1^+ - J_1^-)}{\partial x^2} - \frac{12}{\ell^2} (J_1^+ - J_1^-) = 0 \quad (2.78)$$

### La représentation non chirale

La représentation non chirale consiste à exprimer les équations de transport en termes de grandeurs macroscopiques indépendantes de la chiralité. On utilise donc l'accumulation totale  $n$ , la différence des accumulations  $\delta n$ , le courant de charge  $J_c$  et la polarisation du courant  $J_p$ . On obtient alors les équations :

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} + \frac{3\sigma_D}{2\ell} \frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{\delta n}{\tau} \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial J_c}{\partial x} = 0 \quad (2.80)$$

$$J_p(x) = \frac{v_f}{2} n(x) + \frac{D}{2} \frac{\partial \delta n}{\partial x} \quad (2.81)$$

$$J_c = v_f \delta n + \frac{D}{2} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\sigma_D}{2} \frac{\partial V}{\partial x} \quad (2.82)$$

$$E(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad \frac{\partial E}{\partial x} = \frac{n(x)}{\epsilon} \quad (2.83)$$

Cette représentation est intéressante pour comprendre le lien existant entre les modèles collisionnel et dérive-diffusion. On constate en particulier qu'un courant peut être généré par un gradient de potentiel ou d'accumulation comme pour le modèle dérive-diffusion mais également par une différence d'accumulation chirale  $\delta n$  ce qui est très intuitif puisque un surplus d'électrons pour une chiralité donnée traduit nécessairement un courant dans la même direction (puisque on raisonne en terme d'accumulation de charge). D'autre part, on remarque que la présence d'une accumulation  $n(x)$  provoque une polarisation  $J_p$  de courant non nulle. Cette propriété est assez naturelle puisque pour déformer le profil de densité d'équilibre, il faut accumuler localement de la charge imposant donc une différence dans les flux d'électrons chiraux  $J^+$  et  $J^-$ . On notera le lien de symétrie existant entre  $J_p$  et  $\delta n$ , à savoir qu'un gradient de polarisation génère un écart d'accumulation  $\delta n$  et réciproquement.

### La représentation chirale complète

Cette représentation fait intervenir tous les moments de la distribution et émerge naturellement de la projection de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial J^+}{\partial x} + \frac{3\sigma_D}{4\ell} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{n^- - n^+}{2\tau} \quad (2.84)$$

$$\frac{\partial J^-}{\partial x} - \frac{3\sigma_D}{4\ell} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{n^+ - n^-}{2\tau} \quad (2.85)$$

$$\frac{\sigma_D}{8\ell} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{6} \frac{\partial J_0^+}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial J_1^+}{\partial x} + \frac{J_1^+}{\ell} = 0 \quad (2.86)$$

$$\frac{\sigma_D}{8\ell} \frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{6} \frac{\partial J_0^-}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial J_1^-}{\partial x} + \frac{J_1^-}{\ell} = 0 \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{n^+ + n^-}{\epsilon} \quad E = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (2.88)$$

Pour que ces équations soient fermées, il faut également utiliser la relation qui lie  $J_0^\pm$  à  $n^\pm$  :

$$J_0^\pm = \pm \frac{v_f}{2} n^\pm \quad (2.89)$$

On remarquera que la sommation des deux premières équations conduit à la conservation du courant :

$$\frac{\partial J^+}{\partial x} + \frac{\partial J^-}{\partial x} = 0 \quad (2.90)$$

A travers ces différentes représentation, nous souhaitons montrer qu'on peut établir différentes relations équivalentes entre les diverses quantités macroscopiques.

### 2.2.5 Expressions générales des grandeurs macroscopiques

Pour déterminer les expressions des grandeurs macroscopiques, il suffit de résoudre les équations de transport. La représentation en termes de potentiels chiraux est alors la plus adaptée et nous présentons sa résolution dans l'annexe A.2 à partir de l'équation de Boltzmann.

On obtient alors des profils variant exponentiellement avec la position et dont les longueurs caractéristiques sont le libre parcours moyen  $\frac{\ell}{\sqrt{12}}$  et la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi  $\lambda_{TF}$ . On constate ainsi qu'une longueur supplémentaire apparaît par rapport au modèle dérive-diffusion, le libre parcours moyen. On obtient alors les profils suivants :

#### Les profils de densité de charge

Les profils d'accumulation par chiralités s'écrivent :

$$n^+(x) = \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \frac{1}{2} - \lambda_1 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.91)$$

$$n^-(x) = \frac{3J_c}{2v_f} \left[ -\frac{1}{2} + \lambda_1 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.92)$$

On en déduit alors que l'accumulation de charge prend la forme :

$$n(x) = -\frac{3J_c}{v_f} \left[ \frac{3}{(12-\eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.93)$$

et que l'écart d'accumulation s'écrit :

$$\delta n(x) = \frac{3J_c}{2v_f} \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (2.94)$$

On remarque que les accumulations par chiralité et totale s'écrantent sur les deux longueurs alors que la différence d'accumulation ne fait intervenir que le libre parcours moyen comme longueur de décroissance.

### Les profils de courant

Les composantes isotropes du courant s'obtiennent des profils d'accumulation chiraux par la relation :

$$J_0^\pm(x) = \pm \frac{v_f}{2} n^\pm(x) \quad (2.95)$$

Les composantes anisotropes du courant s'écrivent alors :

$$J_1^+(x) = \frac{J_c}{8} \left[ 1 + \lambda_1 \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right] \quad (2.96)$$

$$J_1^-(x) = \frac{J_c}{8} \left[ 1 - \lambda_1 \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right] \quad (2.97)$$

et ne font intervenir que le libre parcours moyen. On en déduit que les courants chiraux  $J^\pm$  s'écrivent sous la forme :

$$J^+(x) = \frac{3J_c}{4} \left[ \frac{2}{3} - \frac{(6+\eta^2)}{6(12-\eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) - \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.98)$$

$$J^-(x) = \frac{3J_c}{4} \left[ \frac{2}{3} + \frac{(6+\eta^2)}{6(12-\eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.99)$$

et décroissent selon les deux longueurs caractéristiques. On peut aussi en déduire les composantes isotrope et anisotrope totales :

$$J_0(x) = J_0^+(x) + J_0^-(x) = \frac{3J_c}{4} \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (2.100)$$

$$J_1(x) = J_1^+(x) + J_1^-(x) = \frac{J_c}{4} \left[ 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (2.101)$$

qui ne s'écrantent que sur le libre parcours moyen. La polarisation du courant  $J_p$  s'écrit :

$$J_p(x) = J^+(x) - J^-(x) = -\frac{3J_c}{2} \left[ \frac{(6 + \eta^2)}{6(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.102)$$

On a bien évidemment :

$$J_c = J^+(x) + J^-(x) = J_0(x) + J_1(x) \quad (2.103)$$

### Les grandeurs électriques

Le potentiel électrique s'écrit sous la forme :

$$V(x) = \frac{\ell J_c}{\sigma_d} \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} + \frac{\eta^2}{4(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (2.104)$$

Par dérivation, on obtient le champ électrique :

$$E(x) = \frac{J_c}{\sigma_d} \left[ 1 + \frac{\sqrt{12}\eta^2}{4(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \eta \left( \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right) \right] \quad (2.105)$$

qui fournit l'expression du profil de résistivité électrique :

$$\rho(x) = \frac{E(x)}{J_c} = \frac{1}{\sigma_d} \left[ 1 + \frac{\sqrt{12}\eta^2}{4(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \eta \left( \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right) \right] \quad (2.106)$$

On constate en particulier que les grandeurs électriques s'écrantent sur les deux longueurs.

Dans toutes ces expressions, les constantes d'intégration  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  et  $\lambda_5$  seront déterminées par les conditions de raccords aux réservoirs et aux interfaces qu'on précisera dans la suite.

### 2.2.6 Potentiel électrochimique généralisé

Pour le modèle dérive-diffusion, nous avons pu montrer que la densité de courant de charge  $J_c$  dérivait d'un potentiel  $\bar{\mu}$  par la relation (voir les équations 2.36 et 2.37) :

$$J_c = -\sigma_d \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial x} \quad \bar{\mu}(x) = V(x) + \frac{D}{\sigma_d} n(x) \quad (2.107)$$

Peut-on écrire la même chose en présence des chiralités ?

En utilisant la représentation non chirale des équations de transport, on peut montrer que c'est effectivement le cas. Ainsi, en présence des chiralités, la densité de courant  $J_c$  dérive d'un potentiel électrochimique généralisé, noté  $\Phi$  :

$$J_c = -\sigma_d \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad \Phi(x) = \bar{\mu}(x) - \frac{\ell^2}{12} \frac{\partial^2 \bar{\mu}}{\partial x^2} \quad (2.108)$$

et relié au potentiel électrochimique du modèle dérive-diffusion. En particulier, en utilisant les expressions du paragraphe 2.2.5, on obtient :

$$\bar{\mu}(x) = V(x) + \frac{D}{\sigma_d} n(x) = \frac{\ell J_c}{\sigma_d} \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} - \frac{1}{4} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (2.109)$$

On en déduit alors :

$$\Phi(x) = \frac{\ell J_c}{\sigma_d} \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} \right] \quad (2.110)$$

ce qui est bien compatible avec un courant uniforme.

On constate ainsi que dans le modèle collisionnel, le potentiel électrochimique  $\bar{\mu}$  possède une dépendance exponentielle qui n'existe pas dans le modèle dérive-diffusion.

D'autre part, comme dans le cas du modèle dérive-diffusion, la combinaison des équations :

$$J_c = -\sigma_D \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad \frac{\partial J_c}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{n}{\epsilon} \quad (2.111)$$

permet d'obtenir une équation fermée pour l'accumulation de charge totale :

$$\frac{\partial^4 n}{\partial x^4} - \left( \frac{1}{\lambda_{TF}^2} + \frac{12}{\ell^2} \right) \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{12}{\ell^2 \lambda_{TF}^2} n = 0 \quad (2.112)$$

qui est maintenant d'ordre quatre et dont on peut vérifier que les longueurs caractéristiques sont bien données par  $\frac{\ell}{\sqrt{12}}$  et  $\lambda_{TF}$ .

### 2.2.7 La limite Drude

Comme première application des équations de transport, il est instructif de revisiter le modèle de Drude. Cette limite correspond à la solution pour un milieu homogène d'extension infini et donc sans effets de bords et d'interfaces. Dans ce cas, les solutions sont uniformes et indépendantes de la position et doivent donc conduire au résultat bien connu :

$$J_c = \sigma_d E \quad \sigma_d = \frac{e^2 n_0 \tau}{m} \quad (2.113)$$

obtenu à partir du modèle dérive-diffusion, sans tenir des compte des chiralités.

A partir de la représentation non chirale, on constate que si l'on cherche une solution uniforme avec absence d'accumulation, on obtient :

$$\delta n = \frac{3}{2} \frac{\sigma_d}{v_f} E \quad J_p = 0 \quad (2.114)$$

ce qui induit

$$J_c = v_f \delta n - \frac{\sigma_d}{2} E = \sigma_d E \quad (2.115)$$

qui est la relation habituelle bien connue.

On constate ainsi que dans le régime de Drude, le champ électrique génère un écart de densité entre les électrons droits et gauches. En effet, lorsque  $E$  est positif, le courant circule de la gauche vers la droite et pour ce faire il faut créer un déséquilibre électronique favorisant les électrons droits au détriment des électrons gauches. Lorsque le champ électrique est négatif, le courant circule de la droite vers la gauche et le nombre d'électrons gauches doit donc être supérieur au nombre d'électrons droits. En particulier, on constate que cet écart de densité peut être vu comme le moteur du courant et on peut exprimer dans ce cas le courant en terme de cet écart :

$$J_c = \frac{2}{3} v_f \delta n \quad (2.116)$$

qui possède alors une interprétation en terme de courant isotrope assez simple puisque  $\delta n$  mesure la différence des électrons droits et gauches qui se propagent à la vitesse  $v_x$  moyenne  $\frac{v_f}{3}$  et le facteur deux tient simplement compte de la dégénérescence de spin.

Dans ce formalisme, la formule de Drude s'écrit indifféremment :

$$J_c = \sigma_d E = \frac{2}{3} v_f \delta n \quad (2.117)$$

On vérifie en particulier que le courant est fortement isotrope puisque :

$$J_0 = \frac{v_f}{2} \delta n = \frac{3}{4} \sigma_d E = \frac{3}{4} J_c \quad (2.118)$$

$$J_1 = J_1^+ + J_1^- = \frac{1}{4} \sigma_d E = \frac{1}{4} J_c \quad (2.119)$$

Ainsi, la contribution isotrope  $J_0$  est trois fois plus grande que la composante anisotrope  $J_1$ .

Notons pour terminer que dans cet exemple simple, il n'est pas possible de déterminer toutes les grandeurs macroscopiques, on ne peut qu'en exprimer certaines en fonction d'autres. Cela tient au fait que par essence, la présence des chiralités nécessitent l'existence d'effets de bords indispensables pour déterminer univoquement les grandeurs macroscopiques.

## 2.3 Effets de bords et d'interface

Au cours des paragraphes précédents, nous nous sommes intéressés au transport en volume de chaque couche. Cela nous a permis en particulier de déterminer l'expression des diverses grandeurs macroscopiques. Si l'on connaît la dépendance spatiale de ces grandeurs, celles-ci ne seront parfaitement déterminées qu'en spécifiant les expressions des différentes constantes d'intégration ( $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_5, \beta_1$  et  $\beta_2$ ) pour chaque couche. Ces constantes sont déterminées par les conditions de bords et d'interface permettant de raccorder les différentes grandeurs macroscopiques d'une couche à l'autre. Dans cette section, on s'intéressera aux conditions d'interfaces qui grâce aux chiralités auront une forme rappelant le formalisme de la matrice de diffusion du transport à la Landauer ([248]).



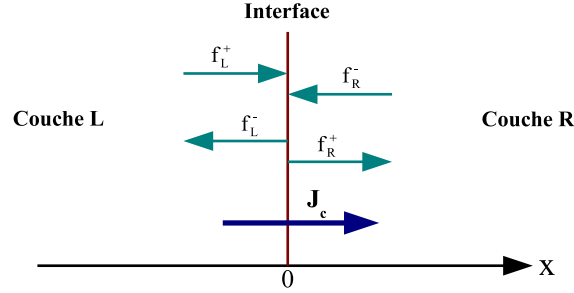


FIGURE 2.4 – Au niveau d’une interface, les propriétés de volume changent abruptement. Le potentiel de diffusion d’interface convertie les électrons arrivants en électrons sortants.

### 2.3.1 Lois de conservation

De façon générale, une interface est une zone de discontinuité des propriétés de volume. Des électrons arrivent et quittent cette zone de transition (voir la figure 2.4) et la relation liant les électrons entrants aux sortants provient du potentiel d’interface diffusant les électrons. Cependant, quelque soit la forme précise de ce potentiel, les grandeurs physiques doivent vérifier des relations de passage très générales dictées par les lois de conservation.

En particulier, comme pour le modèle dérive diffusion, nous adopterons la continuité du potentiel et du champ électrique à une interface :

$$V_L(0) = V_R(0) \quad (2.120)$$

$$E_R(0) = E_L(0) \quad (2.121)$$

où l’on a adopté les notations de la figure 2.4. En particulier, la continuité du champ électrique n’étant possible qu’en l’absence de piégeage des électrons (pas de charge surfacique nette), elle est donc compatible avec la continuité du courant qui se traduit par :

$$J_c = \text{constante} \Leftrightarrow J_L^+(0) + J_L^-(0) = J_R^+(0) + J_R^-(0) \quad (2.122)$$

D’autre part, comme suggéré dans [19] et [247], la conservation du courant qui traduit la conservation de la charge, peut également être interprétée en affirmant que le nombre d’électrons arrivant à l’interface doit égaler le nombre d’électrons quittant celle-ci :

$$n_L^+(0) + n_R^-(0) = n_L^-(0) + n_R^+(0) \Leftrightarrow \delta n_L(0) = \delta n_R(0) \quad (2.123)$$

ce qui montre en particulier que la quantité  $\delta n = n^+ - n^-$  doit être continue à l’interface.

Ainsi, pour décrire les effets d’interfaces, on se placera dans le cas d’une absence de piégeage d’électrons sur l’interface nous conduisant ainsi aux lois de conservation suivantes à imposer à la traversée de l’interface :

– Continuité du potentiel électrique :

$$V_L(0) = V_R(0) \quad (2.124)$$

– Continuité du champ électrique :

$$E_L(0) = E_R(0) \quad (2.125)$$

– Conservation des particules entrantes et sortantes :

$$n_L^+(0) + n_R^-(0) = n_L^-(0) + n_R^+(0) \Leftrightarrow \delta n_L(0) = \delta n_R(0) \quad (2.126)$$

– Conservation du courant :

$$J_c = \text{constante} \Leftrightarrow J_L^+(0) + J_L^-(0) = J_R^+(0) + J_R^-(0) \quad (2.127)$$

Bien que ces relations soient très générales, elles ne suffisent pas à déterminer toutes les constantes d'intégrations. Comme pour le modèle dérive-diffusion, on peut constater que la continuité du courant est automatiquement satisfaite par les formes de solution adoptées (voir le paragraphe 2.2.5) et que le potentiel électrique peut toujours être rendu continu puisqu'il est toujours défini à une constante additive près. On constate alors que seule la continuité du champ électrique et la conservation des particules entrantes et sortantes constituent des équations utiles pour la détermination des constantes d'intégration, il manque donc des équations qui ne peuvent être déterminées qu'en ayant une description microscopique des effets d'interfaces.

### 2.3.2 Collisions d'interface

Lorsqu'un électron atteint l'interface, il est diffusé par le potentiel d'interface qui le transforme nécessairement en électron sortant et modifie son vecteur vitesse. Ainsi, vis-à-vis de la fonction de distribution, l'interface agit comme une intégrale de collision (quelque soit la forme précise de ce potentiel), les fonctions de distribution des électrons sortants sont liées à celles des électrons entrants par des équations du type :

$$f_R^+(\Omega) = 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{LR}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^+(\Omega', v') + 2 \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{RR}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_R^-(\Omega', v') \quad (2.128)$$

$$f_L^-(\Omega) = 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{LL}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^+(\Omega', v') + 2 \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{RL}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_R^-(\Omega', v') \quad (2.129)$$

où on a posé implicitement  $x = 0$  dans les fonctions de distributions (figure 2.4). Notons que ce type de conditions d'interface n'est pas étrangère à la littérature ([76], [64], [193], [253]) et l'originalité provient du traitement que nous allons en donner.

Dans ces équations, les taux de transitions  $W_{ij}$  traduisent les différentes conversions possibles entre états électroniques. Ces taux ne sont fonction que

des angles des vitesses avant et après la collision et la fonction delta en énergie caractérise l'élasticité des collisions. La notation  $f$  désigne ici la fonction de distribution totale, somme de sa partie d'équilibre et de sa partie hors-équilibre puisque ces équations sont générales et applicables quelque soit la forme des fonctions de distribution et la physique de volume.

Ces équations de collision peuvent être simplifiées puisque l'intégrale sur  $d\mathbf{v}'$  peut être faite en partie, on obtient alors :

$$f_R^+(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) W_{LR}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(E) W_{RR}(\theta, \theta', E) f_R^-(\theta', v) \quad (2.130)$$

$$f_L^-(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) W_{LL}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(E) W_{RL}(\theta, \theta', E) f_R^-(\theta', v) \quad (2.131)$$

où on a introduit la densité d'état par chiralité  $\rho(E)_{L,R}^{\pm} = \frac{4\pi\sqrt{2}}{h^3} m_{L,R}^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_{0L,R}}$ .

On constate en particulier que ce type de condition d'interface généralise la notion de collision spéculaire (voir par exemple [75] et [148]) qui ne décrit que les processus de collisions avec retournement de la composante  $v_x$  de la vitesse. Les intégrales de collisions permettent alors de tenir compte de tous les processus de transition possibles et contiennent en particulier les collisions spéculaires.

Les équations 2.130 et 2.131 constituent donc la description microscopique des effets d'interfaces. Celle-ci devant être compatible avec la description macroscopique en termes de lois de conservation, les taux de transition  $W_{ij}$  sont alors liés entre eux par des règles de somme dont la dérivation est fournie en annexe B.1 et qui s'écrivent :

- Règle de somme associée à la conservation des particules entrantes et sortantes :

$$\rho_L^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad (2.132)$$

$$\rho_R^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad (2.133)$$

- Règle de somme associée à la continuité du courant :

$$\rho_L^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \quad (2.134)$$

$$\rho_R^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \quad (2.135)$$

D'autre part, les intégrales de collisions 2.130 et 2.131 étant vraies pour toute fonction de distribution, elles doivent être vérifiées pour la fonction d'équilibre qui est homogène, isotrope et commune à toutes les couches. Pour qu'elle soit solution, il suffit de demander son invariance par les collisions d'interfaces et

conduit à la règle de somme supplémentaire :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_L^+(E) W_{Lj}(\theta, \theta', E) + \rho_R^-(E) W_{Rj}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad j = L, R \quad (2.136)$$

Cette règle de somme est assez naturelle puisque les collisions d'interfaces étant supposées élastiques, toute fonction isotrope en vitesse et commune aux matériaux doit être invariante par les collisions d'interface.

En plus des règles de somme précédentes, on supposera que les taux de transitions sont symétriques sous l'échange des vitesses d'entrée et de sortie :

$$W_{ij}(\Omega, \Omega') = W_{ij}(\Omega', \Omega) \quad (2.137)$$

qui signifie que la transition d'un électron arrivant à la vitesse  $\mathbf{v}$  et quittant l'interface à la vitesse  $\mathbf{v}'$  s'effectue à la même probabilité que la transition d'un électron arrivant à la vitesse  $\mathbf{v}'$  et quittant l'interface à la vitesse  $\mathbf{v}$ . Cette propriété généralise la symétrie de micro-réversibilité utilisée pour le taux de transition de l'équation de Boltzmann de volume et qui laisse invariant ce taux sous l'échange des états avant et après la collision.

### 2.3.3 Développement des taux de collision

Pour rendre utilisable les équations de collisions 2.130 et 2.131, il faut se donner des lois pour les taux de transitions  $W_{ij}$ . Une méthode possible est alors de définir un potentiel de diffusion et de déterminer via la mécanique quantique des expressions pour les taux de transitions en utilisant par exemple l'approximation de Born ([245]). Cependant, une voie possible consiste à remarquer qu'en tant que fonction des angles d'entrée et de sortie ( $\theta'$  et  $\theta$ ), les taux de collisions peuvent être décomposés sur la base des polynômes de Legendre décalés. On peut donc établir un développement général des taux de transition valable quelque soit le type de potentiel de diffusion. En particulier, nous adopterons une décomposition diagonale des taux de transition :

$$\rho_i^\pm W_{ij}(\theta, \theta') = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1)^2 W_{ij}^n(\epsilon) P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \quad (2.138)$$

$$\rho_i^\pm W_{ii}(\theta, \theta') = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) W_{ii}^n(\epsilon) P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \quad (2.139)$$

où les indices  $i$  et  $j$  désignent les symboles L ou R.

Les coefficients  $W_{ij}^n$  dépendent de l'énergie et constituent les paramètres ajustables de la physique d'interface. On notera que l'on a inclus dans ces développements la densité d'état par analogie avec les développements des taux de collision de volume de l'équation de Boltzmann (le taux de transition  $\tau$  contient la densité d'état).

En particulier, ces paramètres sont contraints par les différentes règles de somme établies précédemment :

$$W_{ij}^0 + W_{ii}^0 = 1 \quad (2.140)$$

$$W_{ij}^0 + W_{jj}^0 = 1 \quad (2.141)$$

$$W_{ij}^1 + W_{ii}^1 = \frac{1}{3} \quad (2.142)$$

et conduisent à l'existence de trois paramètres libres qu'on notera  $T$ ,  $t_1$  et  $t_2$  définis par :

$$T = W_{RL}^0 = W_{LR}^0 = 1 - W_{LL}^0 = 1 - W_{RR}^0 \quad (2.143)$$

$$t_1 = 3W_{LR}^{11} = 1 - 3W_{LL}^{11} \quad (2.144)$$

$$t_2 = 3W_{RL}^{11} = 1 - 3W_{RR}^{11} \quad (2.145)$$

Notons que la forme diagonale des taux 2.138 et 2.139 a été retenue dans la mesure où on peut montrer que des termes non diagonaux sont très contraints par les règles de somme et ne font que renormaliser des effets qui sont déjà contenus dans les termes diagonaux. Autrement dit, l'essentielle de la physique est contenue dans les termes diagonaux des taux de transition. De plus, une forme diagonale satisfait automatiquement la condition de symétrie 2.137.

#### Remarque : Collisions spéculaires

Dans le cas présent, nous avons décrit des collisions de nature diffusives dans le sens où le vecteur vitesse change de direction après la collision. Lorsque les collisions sont purement spéculaires, les taux de transitions  $W_{ij}$  doivent être décomposés sous la forme d'une fonction delta de Dirac :

$$\rho_i^\pm W_{ij}(\theta, \theta') = T_{ij}(\theta) \delta(\cos \theta - \cos \theta') \quad (2.146)$$

$$\rho_i^\pm W_{ii}(\theta, \theta') = R_{ii}(\theta) \delta(\cos \theta - \cos \theta') \quad (2.147)$$

où chaque coefficient  $R_{ii}$  et  $T_{ij}$  est lui même décomposable sur les polynômes de Legendre décalés. Dans le cas d'une interface réelle, les deux processus (collisions spéculaires et diffusives) doivent être pris en compte. Dans ce cas, la distinction entre ces deux types de collisions n'est plus nécessaire puisque seule la technique de projection sur les polynômes de Legendre décalés permet de mener les calculs. La fonction delta est alors développée sur les polynômes :

$$\delta(\cos \theta - \cos \theta') = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \quad (2.148)$$

et conduit ainsi à des taux de transition ayant la forme donnée par les développements 2.138 et 2.139. Notons que dans la littérature, il existe des approches (par exemple [66], [76], [77] ou [83] pour le transport électrique et [187] à [196] pour le transport lumineux) utilisant cette idée de collisions diffuses (avec changement dans toutes les directions possibles de la vitesse). La nouveauté provient ici de l'utilisation des polynômes chiraux permettant de traiter analytiquement les équations intégrales de collision sans avoir à spécifier de forme précise pour les taux de transition et de donner une certaine universalité aux effets d'interface.

### 2.3.4 Version macroscopique des collisions d'interface

A partir des équations de collisions d'interface, on peut dériver les équations d'interface manquantes à la détermination des grandeurs macroscopiques. En particulier, on peut traduire les équations de collisions microscopiques 2.130 et 2.131 en termes d'équations sur les variables macroscopiques. Pour réaliser ce passage, il suffit d'utiliser l'expression 2.43 des fonctions de distribution et d'effectuer la moyenne sur la vitesse afin de passer aux variables macroscopiques que sont les densités et les courants chiraux (voir l'annexe B.2). On obtient alors les équations de raccordement d'interface :

$$n_R^+ = T n_L^+ + (1 - T) n_R^- \quad (2.149)$$

$$n_L^- = (1 - T) n_L^+ + T n_R^- \quad (2.150)$$

$$J_R^+ = T J_{0L}^+ + t_1 J_{1L}^+ - (1 - T) J_{0R}^- - (1 - t_2) J_{1R}^- \quad (2.151)$$

$$J_L^- = T J_{0R}^- + t_2 J_{1R}^- - (1 - T) J_{0L}^+ - (1 - t_1) J_{1L}^+ \quad (2.152)$$

Nous obtenons ainsi des équations ayant un sens assez familier et dont les effets d'interfaces sont encodés dans des coefficients de transmission généralisés  $T$ ,  $t_1$  et  $t_2$  dont seule la valeur à l'énergie de Fermi nous intéresse ici. On constate en particulier que le coefficient de transmission  $T$  contrôle les transferts d'électrons en apparaissant d'une part dans les équations sur les densités et d'autre part devant les termes de courants isotropes dans les équations sur les courants. Les équations sur les courants expriment les courants globaux quittant l'interface en fonction des différentes composantes (isotrope et anisotrope) incidentes. On remarque alors que les transmissions  $t_1$  et  $t_2$  contrôlent les transferts de courants anisotropes. On les appellera donc transmission anisotrope. On vérifiera que ces équations sont bien compatibles avec la conservation du courant et des particules. Le coefficient de transmission  $T$  sera nommé coefficient isotrope.

Il faut noter que cette forme simple des conditions d'interfaces provient du fait que la dérivée de la fonction d'équilibre fait apparaître une fonction delta en énergie permettant un passage au niveau macroscopique aisé. D'autre part, il faut avoir à l'esprit que ces équations ne concernent que les parties hors-équilibre des grandeurs macroscopiques. En particulier, on peut vérifier que si les grandeurs d'équilibre vérifient bien la loi de conservation des particules entrantes et sortantes et la continuité du courant, elles ne vérifient pas les conditions de bords de type réflexion-transmission qu'on vient d'établir. Toutefois, par construction la fonction de distribution vérifie bien les équations microscopiques de collisions dont le passage à une vision macroscopique fait disparaître cet aspect.

Les équations de collisions macroscopiques peuvent être écrites de bien des façons. En particulier, les équations sur les densités peuvent être écrites sans chiralités. On obtient alors :

$$\delta n_R = \delta n_L \quad (2.153)$$

$$n_R - n_L = -\frac{2(1-T)}{T} \delta n_{R,L} \quad (2.154)$$

qui montrent en particulier comment le saut d'accumulation à l'interface est lié à la réflectivité de l'interface ( $R = 1 - T$ ). On constate alors que l'accumulation est continue pour une interface parfaite ( $T = 1$ ). D'autre part, on constatera que l'équation sur le saut de densité est parfaitement définie puisque la quantité  $\delta n$  est continue.

De la même façon, les équations sur les courants peuvent être écrites en termes des courants chiraux globaux et des densités chirales :

$$J_R^+ = t_1 J_L^+ - (1 - t_2) J_R^- + (T - t_1) \frac{v_{fL}}{2} n_L^+ - (T - t_2) \frac{v_{fR}}{2} n_R^- \quad (2.155)$$

$$J_L^- = t_2 J_R^- - (1 - t_1) J_L^+ - (T - t_2) \frac{v_{fR}}{2} n_R^- + (T - t_1) \frac{v_{fL}}{2} n_L^+ \quad (2.156)$$

Il est intéressant de noter que les équations sur les courants peuvent être transformées sous la forme commune :

$$J_c = T J_{0L}^+ + t_1 J_{1L}^+ + T J_{0R}^- + t_2 J_{1R}^- \quad (2.157)$$

qui traduit la répartition du courant au niveau de l'interface sur les différentes composantes incidentes possibles.

Comme pour les équations de transport, il existe donc plusieurs représentations possibles des conditions d'interface. La chose intéressante dans ces équations est qu'elles ressemblent beaucoup à des équations que l'on pourrait écrire en construisant un modèle de transport 1D purement macroscopique en appliquant des conditions d'interface de type spéculaire puisqu'au final elles ne sont qu'une forme d'équations de type réflexion-transmission habituelles. Cependant, la dérivation microscopique de ces équations montre qu'elles sont plus que de simples équations de type réflexion-transmission puisqu'elles émergent d'intégrales de collisions qui vont bien au delà des collisions spéculaires. Cette perte d'information sur les collisions microscopiques provient simplement du fait que la théorie macroscopique est moins détaillée que la théorie microscopique la faisant émerger.

### 2.3.5 Bilan : conditions de bords et d'interfaces

Au cours du paragraphe précédent, nous avons donc établi les équations d'interfaces manquantes pour compléter les lois de conservation d'interface. Dans cette section, nous faisons le bilan des conditions d'interface à utiliser en pratique pour résoudre un multicouche et nous donnons les conditions de raccord aux réservoirs. Etant donné l'existence de différentes représentations pour les équations de collisions macroscopiques, les conditions d'interfaces peuvent donc être écrites de plusieurs manières. Le lecteur peut donc à son gré changer la représentation choisie ici.

Ainsi, les conditions de raccordement à une interface s'écrivent :

– La conservation du nombre de particules :

$$\begin{cases} \delta n_L = \delta n_R \\ n_R - n_L = -\frac{2(1-T)}{T} \delta n_{R,L} \end{cases} \quad (2.158)$$

– La conservation du courant :

$$\begin{cases} J_c = \text{constante} \\ J_c = T J_{0L}^+ + t_1 J_{1L}^+ + T J_{0R}^- + t_2 J_{1R}^- \end{cases} \quad (2.159)$$

– La continuité du champ électrique :

$$E_L = E_R \quad (2.160)$$

– La continuité du potentiel électrique :

$$V_L = V_R \quad (2.161)$$

Concernant la connexion aux réservoirs, on supposera (comme c'est le cas pour le modèle de Landauer ([246], [247], [248])) qu'ils injectent des électrons dans un état d'équilibre thermodynamique. Cette condition implique donc que les parties hors-équilibre des fonctions de distribution des électrons entrants ( $g^+$  à gauche et  $g^-$  à droite) s'annulent aux points de connexion. Ceci se répercutent alors sur tous les moments de la distribution et conduit aux équations de raccords aux réservoirs :

– Réservoir de gauche :

$$n^+ = 0 \quad J_d^+ = 0 \quad V = V_1 \quad (2.162)$$

– Réservoir de droite

$$n^- = 0 \quad J_d^- = 0 \quad V = V_2 \quad (2.163)$$

Dans ces équations, nous avons ajouté la continuité du potentiel électrique qui vaut le potentiel appliqué à chaque borne du système. Dans un langage d'équation de transfert radiatif, ces équations signifient que l'intensité diffusée entrante est nulle ([202], [203], [204] ou encore [245]).

Ainsi, l'utilisation de ces conditions de raccords aux interfaces et aux réservoirs suffisent à déterminer toutes les constantes d'intégration et permettent de traiter tout type de multicouche.

## 2.4 La limite dérive-diffusion

Dans cette section, nous allons montrer comment, à partir du modèle collisionnel, le modèle dérive-diffusion peut être retrouvé.



### 2.4.1 Développement en puissance du nombre de Knudsen

Une différence existant entre le modèle dérive-diffusion et le modèle collisionnel provient de la structure du courant. En effet, pour le modèle dérive-diffusion, le courant dérive du potentiel électrochimique  $\bar{\mu}$  (voir 2.36) alors qu'il dérive du potentiel généralisé  $\Phi$  (2.108) pour le modèle collisionnel. En particulier, le nouveau potentiel  $\Phi$  s'exprime en fonction de l'ancien et on constate qu'en adimensionnant la coordonnée  $x$  par l'épaisseur  $\Delta$  ( $\bar{x} = \frac{x}{\Delta}$ ), on peut écrire la relation liant  $\Phi$  à  $\bar{\mu}$  sous la forme :

$$\Phi(\bar{x}) = \bar{\mu}(\bar{x}) - \frac{\kappa^2}{12} \frac{\partial^2 \bar{\mu}}{\partial \bar{x}^2} \quad (2.164)$$

où l'on a introduit le nombre de Knudsen  $\kappa = \frac{\ell}{\Delta}$ . On constate alors qu'en effectuant la limite  $\kappa = 0$ , le terme de dérivée seconde disparaît et restitue le potentiel électrochimique du modèle dérive-diffusion.

Pour comprendre le sens de cette limite, notons que lorsque  $\kappa > 1$  le libre parcours moyen est plus grand que l'épaisseur de la couche, les électrons peuvent alors traverser la couche sans subir de collisions et les effets d'interface sont alors prédominants. Dans le cas contraire, lorsque  $\kappa < 1$ , le libre parcours moyen est plus petit que l'épaisseur de la couche et dans ce cas, les collisions de volume l'emportent sur les effets d'interfaces. Ainsi, prendre la limite  $\kappa = 0$  revient à considérer l'épaisseur de la couche infiniment grande devant le libre parcours moyen et à négliger les collisions d'interfaces devant celles de volume. La prise en compte des chiralités permet donc d'effectuer un développement en puissance du nombre de Knudsen. Cette propriété est assez naturelle puisque les chiralités ont été introduites à l'origine pour mieux décrire les effets d'interfaces qui sont importants dans des régimes où le nombre de Knudsen est supérieur à l'unité. Lorsque  $\kappa < 1$ , on s'attend à ce que les collisions de volume soient prédominantes sur les propriétés globales du système, l'effet des interfaces est alors minimisé et la physique de volume peut être décrite sans chiralité.

Cependant, en utilisant les équations 2.81 à 2.82 de la représentation non chirale des équations de transport et en injectant dans celles-ci la relation  $J_c = -\sigma_d \partial_x \bar{\mu}$ , on constate que les équations dégèrent sous la forme :

$$J_p(x) = \frac{v_f}{2} n(x) \quad \delta n = -\frac{3\sigma_D}{2v_f} \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial x} \quad (2.165)$$

On remarque ainsi, que les termes d'origine chirale, à savoir  $J_p$  et  $\delta n$ , ne sont pas nuls dans la limite dérive-diffusion. Cette propriété est similaire à la limite Drude et est dû à la dualité entre les descriptions conductive et chirale en régime collisionnel. En particulier, on constate à nouveau qu'on peut écrire le courant en terme de l'écart  $\delta n$  :

$$J_c = \frac{2}{3} v_f \delta n \quad (2.166)$$

montrant ainsi que dans la limite dérive-diffusion, la quantité  $\delta n$  est uniforme. On constate en particulier que cette expression du courant coïncide avec celle obtenue dans la limite Drude, conséquence logique puisque la limite Drude et la limite dérive-diffusion correspondent tout deux à une limite d'épaisseur infinie

( $\kappa = 0$ ). La seule différence étant que dans un cas on cherche une solution uniforme (limite Drude) alors que dans l'autre on cherche une solution inhomogène (limite dérive-diffusion).

Notons enfin qu'en utilisant la définition 2.67 du courant  $J_p$ , on constate que la limite dérive-diffusion consiste à poser :

$$J_p(x) = \frac{v_f}{2} n(x) \Rightarrow g_1^+ + g_1^- = 0 \quad (2.167)$$

et revient à supposer la nullité de la somme des composantes d'ordre un des fonctions de distribution.

La validité du modèle dérive-diffusion pour des petits nombres de Knudsen est connu d'autres domaines comme le transport de la lumière où un modèle équivalent peut être dérivé à partir de l'équation de transfert radiatif ([203], [204]). Nous en donnons ici une justification pour le transport électrique et nous allons maintenant montrer que les expressions établies dans ce paragraphe ne sont la conséquence que du changement de base de projection.

### 2.4.2 Changement de base de projection

Le modèle dérive-diffusion a été obtenu à partir de l'équation de Boltzmann décrivant l'évolution de la fonction de distribution totale  $f(x, \theta)$ . Le passage aux chiralités a consisté à scinder cette fonction de distribution en deux quantités décrivant chacune une partie des électrons suivant leurs chiralités. Cependant, qu'on travaille avec la fonction totale  $f$  ou avec les fonctions chirales  $f^\pm$ , on décrit toujours la même physique (elles caractérisent toujours le même gaz d'électrons), il doit donc exister un lien entre ces fonctions. De plus, on aimerait comprendre pourquoi l'ajout des chiralités semble capturer plus d'informations de l'équation de Boltzmann que le cas non chiral.

Dans le cas non chiral, l'angle  $\theta$  peut parcourir l'intervalle  $[0, \pi]$ . Dans ce cas, la base de polynômes adaptée à la décomposition de la fonction de distribution est celle des polynômes de Legendre normaux (notés  $P_\ell$ ) :

$$f(x, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} f_\ell(x) P_\ell(\cos \theta) \quad (2.168)$$

puisqu'ils sont orthogonaux sur cet intervalle. En revanche, pour les fonctions de distribution chirales, l'angle  $\theta$  parcourt maintenant l'intervalle  $[0, \frac{\pi}{2}]$ , il faut avoir recours aux polynômes de Legendre décalés (notés  $\bar{P}_n$ ) :

$$f^\pm(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n^\pm(x) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (2.169)$$

Cependant, à partir de la fonction de distribution non chirale, on peut effectuer la séparation en chiralité puisque, lorsque  $\cos \theta > 0$ , la fonction est simplement nommée  $f^+$  :

$$f^+(x, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} f_\ell(x) P_\ell(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n^+(x) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (2.170)$$

alors que lorsque  $\cos \theta < 0$ , on remplace  $\cos \theta$  par  $-\cos \theta$  et la fonction de distribution est nommée  $f^-$  :

$$f^-(x, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} (-1)^\ell f_\ell(x) P_\ell(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n^-(x) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (2.171)$$

où on a utilisé la propriété de parité des polynômes de Legendre standards.

Dans ce cas, la correspondance entre les composantes  $f_n^\pm$  et  $f_\ell$  est obtenue en utilisant les propriétés d'orthogonalités des polynômes :

$$f_n^\pm = (2n+1) \sum_{\ell=0}^{+\infty} (\pm 1)^\ell \alpha_{n\ell} f_\ell \quad \alpha_{n\ell} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_n(\cos \theta) P_\ell(\cos \theta) \quad (2.172)$$

$$f_\ell = \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \gamma_{\ell n} f_n^+ \quad \gamma_{\ell n} = \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (2.173)$$

avec la relation :

$$\delta_{\ell, \ell'} = \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) \gamma_{\ell n} \alpha_{n\ell'} \quad (2.174)$$

Pour calculer les coefficients  $\alpha_{n\ell}$ , il suffit d'exprimer les polynômes de Legendre normaux sur la base des décalés. Par exemple,

$$P_0 = \bar{P}_0 \quad P_1 = \frac{1}{2} (\bar{P}_1 + \bar{P}_0) \quad P_2 = \frac{1}{4} \bar{P}_2 + \frac{3}{4} \bar{P}_1 \quad (2.175)$$

$$P_3 = \frac{1}{8} \bar{P}_3 + \frac{15}{24} \bar{P}_2 + \frac{3}{8} \bar{P}_1 - \frac{1}{8} \bar{P}_0 \quad (2.176)$$

$$P_4 = \frac{1}{16} \bar{P}_4 + \frac{7}{16} \bar{P}_3 + \frac{5}{8} \bar{P}_2 - \frac{1}{8} \bar{P}_1 \quad (2.177)$$

et ainsi de suite.

D'autre part, à partir de la relation

$$f_\ell = \frac{(2\ell+1)}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) f(\theta) \quad (2.178)$$

on peut montrer la relation intéressante :

$$f_\ell = \frac{(2\ell+1)}{2} \left[ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) f^+(\theta) + (-1)^\ell \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) f^-(\theta) \right] \quad (2.179)$$

qui permet de relier les composantes de la base standard aux composantes chirales. Par exemple, pour les trois premières composantes, on a :

$$f_0 = \frac{1}{2} (f_0^+ + f_0^-) \quad (2.180)$$

$$f_1 = \frac{3}{2} \left[ \frac{1}{2} (f_0^+ - f_0^-) + \frac{1}{6} (f_1^+ - f_1^-) \right] \quad (2.181)$$

$$f_2 = \frac{5}{8} (f_1^+ + f_1^-) + \frac{1}{8} (f_2^+ + f_2^-) \quad (2.182)$$

qui constituent des relations exactes. En fait, toutes les relations établies jusqu'à présent sont exactes et permettent de faire le lien entre la représentation chirale et non chirale. Regardons maintenant ce qu'elles signifient en pratique.

Imaginons que soit donnée une approximation à l'ordre un de la fonction de distribution non chirale :

$$f = f_0 + f_1 P_1(\cos \theta) \quad (2.183)$$

En utilisant la relation 2.172, on constate qu'on ne peut construire que les composantes chirales d'ordre zéro et un :

$$f_0^\pm = f_0 \pm \frac{f_1}{2} \quad f_1^\pm = \pm \frac{1}{2} f_1 \quad f_n^\pm = 0 \quad n \geq 2 \quad (2.184)$$

Si l'on donne maintenant une approximation à l'ordre un des composantes chirales :

$$f^\pm = f_0^\pm + f_1^\pm \bar{P}_1(\cos \theta) \quad (2.185)$$

alors les choses sont toutes autres puisqu'on peut construire une approximation de chaque composante de la fonction non chirale :

$$f_0 = \frac{1}{2} (f_0^+ + f_0^-) \quad (2.186)$$

$$f_1 = \frac{3}{2} \left[ \frac{1}{2} (f_0^+ - f_0^-) + \frac{1}{6} (f_1^+ - f_1^-) \right] \quad (2.187)$$

$$f_2 = \frac{5}{8} (f_1^+ + f_1^-) \quad (2.188)$$

$$f_3 = \frac{7}{2} \left[ \frac{1}{8} (f_1^+ - f_1^-) - \frac{1}{8} (f_0^+ - f_0^-) \right] \quad (2.189)$$

$$f_4 = -\frac{3}{16} (f_1^+ + f_1^-) \quad (2.190)$$

et ainsi de suite. On voit alors tout l'intérêt des chiralités puisque connaissant seulement quatre composantes ( $f_0^\pm, f_1^\pm$ ) il est possible de construire une approximation de l'ensemble infini des composantes de la fonction de distribution totale. On comprend alors pourquoi la chiralisation de l'équation de Boltzmann permet d'extraire plus d'informations que la méthode standard puisque cette méthode restructure l'équation en mélangeant toutes les composantes de la fonction de distribution non chirale. On constate en particulier qu'un développement tronqué à l'ordre un dans la base chirale consiste en fait en un développement d'ordre infini dans la base non chirale.

La conséquence essentielle de ces formules de changement de base est qu'à partir d'une théorie non chirale, il est possible de reconstruire des quantités chirales. Ainsi, le modèle dérive-diffusion suppose implicitement que les quantités chirales fondamentales  $n^\pm$  et  $J_1^\pm$  sont de la forme :

$$n^\pm(x) = \frac{n(x)}{2} \pm \frac{3J_c}{4v_f} \quad J_1^\pm = \frac{J_c}{8} \quad (2.191)$$

montrant en particulier que les composantes diffusives du courant sont uniformes. Les courants chiraux s'écrivent alors :

$$J^\pm(x) = \frac{J_c}{2} \pm \frac{v_f}{4}n(x) \quad (2.192)$$

et impliquent automatiquement

$$J_c = \frac{2}{3}v_f\delta n \quad J_p(x) = J^+(x) - J^-(x) = \frac{v_f}{2}n(x) \quad (2.193)$$

qui sont les relations obtenues au paragraphe précédent et qui découlent comme conséquence du changement de base de projection.

Notons pour terminer qu'à l'ordre un dans la base chirale correspond une composante  $f_2$  de la base non chirale qui n'est fonction que de la somme  $f_1^+ + f_1^-$  (relation 2.188). Or, nous avons montré au paragraphe précédent que la limite dérive-diffusion consistait à choisir cette somme nulle induisant du même coup la nullité de la composante d'ordre deux de la base non chirale. Cette propriété est bien consistante avec le modèle dérive-diffusion qui n'est qu'une approximation d'ordre un dans la base non chirale et suppose implicitement la nullité de la composante d'ordre deux.

Les relations de changement de base que nous venons de démontrer peuvent être utilisées pour chiraliser l'équation de Boltzmann (en particulier pour transformer l'intégrale de collision) et explique le passage de l'équation 2.8 aux équations 2.42.

Remarque : Les expressions des densités chirales  $n^\pm$  et des courants chiraux  $J^\pm$  obtenus pour le modèle dérive-diffusion peuvent être déduites par la méthode suivante empruntée au transport lumineux ([245], [202], [203]). Pour le modèle dérive-diffusion, les grandeurs macroscopiques s'expriment par les intégrales :

$$n(x) = \frac{3}{4}en_0 \int_0^\pi d\theta \sin \theta g(x, \theta) \quad J_c = \frac{3}{4}en_0 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta g(x, \theta) \quad (2.194)$$

où la fonction de distribution est tronquée à l'ordre un sur les polynômes de Legendre standards  $g = g_0 + g_1 \cos \theta$ . Ainsi, les quantités  $n^+$  et  $J^+$  s'obtiennent de ces expressions en intégrant seulement sur le quart  $[0, \frac{\pi}{2}]$  et les grandeurs  $n^-$  et  $J^-$  se déterminent par intégration sur le quart  $[\frac{\pi}{2}, \pi]$ . Cette technique conduit alors aux expressions 2.191 et 2.192 établies précédemment.

### 2.4.3 Conditions d'interface associées au modèle dérive-diffusion

L'utilisation des expressions des quantités chirales 2.191 dans les équations de transport du modèle collisionnel restitue bien les équations de transport 2.27 à 2.29 du modèle dérive-diffusion. Dans cette dernière partie, nous allons établir, en relation avec les approches existantes, les équations d'interface liés au modèle

dérive-diffusion.

A partir des relations 2.191, on constate que les composantes anisotropes du courant sont mal décrites dans le modèle dérive-diffusion. Celles-ci sont uniformes et ne peut donc pas leur imposer de conditions d'interface autre que la conservation du courant. Ceci est la conséquence du fait que dans une approche de type dérive-diffusion, la fonction de distribution approchée obtenue ne contient pas toute l'information sur les chiralités. A cause de cela, il existe toujours un certain arbitraire dans le choix des conditions de bords et d'interface à utiliser pour le modèle dérive-diffusion. Un choix assez naturel serait d'écrire des équations sur les accumulations en utilisant les relations 2.191 dans les conditions d'interfaces et de bords 2.149, 2.150, 2.162 et 2.163 du modèle collisionnel. Cependant, il a été montré dans la littérature ([245], [203], [20] et [21]) qu'un choix plus adapté consistait à imposer des conditions sur les courants chiraux globaux  $J^\pm$  (c'est à dire la somme de la composante isotrope et anistrophe) et c'est ce choix que nous allons faire ici pour rester cohérent avec les approches existantes.

Pour écrire une condition d'interface portant sur les courants chiraux globaux à partir de celles du modèle collisionnel, on utilise la relation 2.157 de répartition du courant à l'interface en utilisant l'hypothèse supplémentaire  $T = t_1 = t_2$ . En utilisant ensuite les expressions 2.192 des courants chiraux, on obtient ainsi une équation non chirale portant sur les accumulations :

$$v_{fR}n_R - v_{fL}n_L = -\frac{4(1-T)}{T}J_c \quad (2.195)$$

et qui est plus naturelle pour le modèle dérive-diffusion.

Cette équation permet alors de générer un ensemble de conditions d'interface bien posé pour le modèle dérive-diffusion :

– Saut d'accumulation :

$$v_{fR}n_R - v_{fL}n_L = -\frac{4(1-T)}{T}J_c \quad (2.196)$$

– La conservation du courant :

$$J_c = \mathbf{constante} \quad (2.197)$$

– La continuité du champ électrique :

$$E_L = E_R \quad (2.198)$$

– La continuité du potentiel électrique :

$$V_L = V_R \quad (2.199)$$

et dans lesquelles les chiralités ont disparu.

Concernant les équations de connexion aux réservoirs, il suffit de remarquer que l'annulation simultanée des accumulations et courant anisotrope entrant est

équivalente à l'annulation des courants entrants ( $J^+ = 0$  pour le réservoir de gauche et  $J^- = 0$  pour le réservoir de droite). En utilisant ensuite les relations 2.192 des courants chiraux, on obtient alors les conditions aux limites :

– Reservoir de gauche :	$n = -\frac{2J_c}{v_f} \quad V = V_1$	(2.200)
-------------------------	---------------------------------------	---------

– Reservoir de droite :	$n = \frac{2J_c}{v_f} \quad V = V_2$	(2.201)
-------------------------	--------------------------------------	---------

Ainsi, muni de ces conditions de bords et d'interface, on peut traiter un multicouche quelconque à partir du modèle dérive diffusion.

## 2.5 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons développé un modèle de transport macroscopique adapté au régime de transport diffusif (le modèle collisionnel) et distinguant les électrons se propageant vers la droite de ceux se dirigeant vers la gauche. La chiralisation a permis d'établir un ensemble d'équations de transport de volume et de conditions de bords et d'interfaces adaptées au transport diffusif en s'inspirant du formalisme de Landauer. Nous avons pu montrer en particulier que le modèle dérive-diffusion ne constitue qu'un cas limite de ce nouveau formalisme. Notons enfin que la dérivation du modèle collisionnel a montré que pour intégrer une description des effets d'interface en terme de collision, il était nécessaire de modifier les équations de transport de volume afin qu'elles contiennent l'information suffisante pour être compatible avec les effets de bords et d'interface. Cette caractéristique met à mal une certaine systématique qui consiste à résoudre les équations de volume (à une certaine approximation) indépendamment de la forme des conditions d'interfaces et explique en partie la difficulté de faire émerger un tel modèle. Pour terminer ce chapitre, nous présentons en complément d'autres formulations possibles des équations de collision d'interface. En particulier, la forme que nous avons retenu dans ce chapitre rappelant le formalisme de la matrice de diffusion du transport à la Landauer, nous pouvons également dériver une approche dont l'analogie balistique est celui de la matrice de transfert ([248]). Nous présentons aussi une approche dite mixte afin de montrer la souplesse du formalisme.

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface

Au paragraphe 2.3.2, les collisions d'interface ont été définies sous une approche du type matrice de diffusion, c'est à dire que les fonctions de distribution des électrons sortants ont été exprimées en fonction de celles des électrons entrants. Pour terminer ce chapitre, nous allons établir d'autres formulations équivalentes des collisions d'interfaces. En particulier, nous allons développer une approche dont l'analogie balistique correspond au formalisme de la matrice de transfert et exprimant les fonctions de distributions des électrons à droite de l'interface en fonction de celles se situant à gauche. Nous développerons également une approche mixte qui consiste à exprimer les fonctions de distributions des chiralités positives en fonction de celles des chiralités négatives.

### 2.6.1 Approche du type matrice de transfert

#### Définition

Dans le formalisme de Landauer, la matrice de transfert ([248]) permet d'exprimer les propriétés des électrons à droite de la zone de diffusion en fonction de celles se situant à gauche. Dans cette logique, les équations de collisions d'interfaces prennent donc la forme :

$$\begin{aligned} f_R^+(\Omega, v) &= 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' M^{++}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^+(\Omega', v') + \\ & 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' M^{+-}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^-(\Omega', v') \end{aligned} \quad (2.202)$$

$$\begin{aligned} f_R^-(\Omega, v) &= 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' M^{-+}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^+(\Omega', v') + \\ & 2 \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v}' M^{--}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_L^-(\Omega', v') \end{aligned} \quad (2.203)$$

Dans ces relations, les quantités  $M^{ij}$  représente les taux de transitions reliant la chiralité de gauche  $j$  à la chiralité de droite  $i$ . La présence de la fonction delta traduit la nature élastique des collisions. Dans le cas présent, les fonctions de distributions ne dépendent que de l'angle  $\theta$  et les relations précédentes peuvent être simplifiées sous la forme :

$$f_R^+(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) M^{++}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(E) M^{+-}(\theta, \theta', E) f_L^-(\theta') \quad (2.204)$$

$$f_R^-(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) M^{-+}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(E) M^{--}(\theta, \theta', E) f_L^-(\theta') \quad (2.205)$$

où  $\rho_L^\pm$  désigne les densités d'états par chiralité.



## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 55

Comme pour la représentation de type matrice de diffusion, les taux de transition  $M^{ij}$  sont décomposés sur la base des polynômes de Legendre décalés :

$$\rho_L^j(E)M^{ij}(\theta, \theta', E) = \sum_{\alpha=0}^{+\infty} (2\alpha + 1)^2 M_{\alpha}^{ij}(E)P_{\alpha}(\cos \theta)P_{\alpha}(\cos \theta') \quad (2.206)$$

Pour contraindre les paramètres libres  $M_{\alpha\beta}^{ij}$ , il faut rendre compatible les équations de collisions avec les lois de conservation. Cependant, une autre voie s'offre à nous puisque ces équations décrivant la même physique que les équations 2.130 et 2.131, les taux de transitions  $M^{ij}$  doivent pouvoir être reliés aux taux de transition  $W_{mn}$  des premières équations de collision. Cette seconde méthode que nous allons développer est plus rapide et permettra de relier directement les coefficients  $M_{\alpha\beta}^{ij}$  aux paramètres libres  $T$ ,  $t_1$  et  $t_2$  introduits précédemment. De plus, cette technique a l'avantage d'inclure directement les règles de sommes issues des lois de conservation puisque les taux  $W_{mn}$  ont déjà été contraints.

### Règles de somme

Avant d'établir le lien existant entre les taux  $M^{ij}$  et  $W_{mn}$ , nous allons présenter les règles de somme satisfaites par les taux de collisions  $M^{ij}$ .

L'obtention des règles de somme pour les taux de transitions  $M^{ij}$  s'effectue de la même manière que celles correspondant aux taux  $W_{mn}$  et s'écrivent :

– La conservation des particules entrantes et sortantes fournit :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [\rho_L^-(E)M^{--}(\theta, \theta') - \rho_L^-(E)M^{+-}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.207)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [\rho_L^+(E)M^{++}(\theta, \theta') - \rho_L^+(E)M^{-+}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.208)$$

qui se traduisent par :

$$\boxed{M_{00}^{--} - M_{00}^{+-} = 1 \quad M_{00}^{++} - M_{00}^{-+} = 1} \quad (2.209)$$

– La continuité du courant implique :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [\rho_L^-(E)M^{+-}(\theta, \theta') - \rho_L^-(E)M^{--}(\theta, \theta')] = -\cos \theta' \quad (2.210)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [\rho_L^+(E)M^{++}(\theta, \theta') - \rho_L^+(E)M^{-+}(\theta, \theta')] = \cos \theta' \quad (2.211)$$

qui s'écrivent en termes de composantes :

$$\boxed{M_{00}^{++} - M_{00}^{-+} = 1 \quad M_{00}^{+-} - M_{00}^{--} = -1} \quad (2.212)$$

$$\boxed{3M_{11}^{++} - 3M_{11}^{-+} = 1 \quad 3M_{11}^{+-} - 3M_{11}^{--} = -1} \quad (2.213)$$

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 56

– La compatibilité avec l'état d'équilibre conduit à :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [\rho_L^+(E) M^{++}(\theta, \theta') + \rho_L^-(E) M^{+-}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.214)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [\rho_L^+(E) M^{-+}(\theta, \theta') + \rho_L^-(E) M^{--}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.215)$$

qui donnent alors :

$$\boxed{M_{00}^{++} + M_{00}^{+-} = 1 \quad M_{00}^{-+} + M_{00}^{--} = 1} \quad (2.216)$$

– La symétrie entrant-sortant est naturellement vérifiée avec une décomposition purement diagonale des taux de transition.

### Relations intégrales entre les taux de scattering $W_{mn}$ et les taux de transfert $M^{ij}$

Lors de l'établissement des conditions d'interface, nous avons adopté l'approche matrice de diffusion du formalisme de Landauer. Les équations de collisions exprimant les électrons sortants en fonction des entrants sont alors données par les équations 2.130 et 2.131 qu'on rappelle ici :

$$f_R^+(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) W_{LR}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(E) W_{RR}(\theta, \theta', E) f_R^-(\theta', v) \quad (2.217)$$

$$f_L^-(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) W_{LL}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(E) W_{RL}(\theta, \theta', E) f_R^-(\theta', v) \quad (2.218)$$

Dans le formalisme de la matrice de transfert, on exprime les fonctions de distribution à droite de l'interface en fonction de celles à gauche de celle-ci. Dans ce cas, les équations prennent la forme :

$$f_R^+(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) M^{++}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(E) M^{+-}(\theta, \theta', E) f_L^-(\theta') \quad (2.219)$$

$$f_R^-(\theta) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) M^{-+}(\theta, \theta', E) f_L^+(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(E) M^{--}(\theta, \theta', E) f_L^-(\theta') \quad (2.220)$$

Ces deux formulations devant être équivalentes, les équations de collisions doivent donc être conservées lorsqu'on combine les deux approches. En particulier, en injectant l'expression 2.218 de  $f_L^-$  dans l'équation 2.219, nous devons retrouver l'équation 2.217. Ceci nous amène à poser :

$$\rho_L^+ M^{++}(\theta, \theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta'' \sin \theta'' \rho_L^-(E) M^{+-}(\theta, \theta'', E) \rho_L^+ W_{LL}(\theta'', \theta') = \rho_L^+ W_{LR}(\theta, \theta') \quad (2.221)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta'' \sin \theta'' \rho_L^-(E) M^{-+}(\theta, \theta'', E) \rho_R^- W_{RL}(\theta'', \theta') = \rho_R^- W_{RR}(\theta, \theta') \quad (2.222)$$

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 57

De même, en injectant l'expression 2.220 dans l'équation 2.218, la fonction de distribution  $f_L^-$  doit être invariante. On pose donc :

$$\rho_L^+ W_{LL}(\theta, \theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^- W_{RL}(\theta, \theta') \rho_L^+ M^{-+}(\theta', \theta'') = 0 \quad (2.223)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^- W_{RL}(\theta, \theta') \rho_L^+ M^{--}(\theta', \theta'') = \delta(\cos \theta - \cos \theta'') \quad (2.224)$$

Traduites en composantes, ces quatre équations s'écrivent :

$$M_{\alpha\alpha}^{++} + (2\alpha + 1) M_{\alpha\alpha}^{+-} W_{LL}^{\alpha\alpha} = 0 \quad (2.225)$$

$$(2\alpha + 1) M_{\alpha\alpha}^{+-} W_{RL}^{\alpha\alpha} - W_{RR}^{\alpha\alpha} = 0 \quad (2.226)$$

$$W_{LL}^{\alpha\alpha} + (2\alpha + 1) M_{\alpha\alpha}^{-+} W_{RL}^{\alpha\alpha} = 0 \quad (2.227)$$

$$(2\alpha + 1)^2 M_{\alpha\alpha}^{--} W_{RL}^{\alpha\alpha} = 1 \quad (2.228)$$

et permettent d'exprimer les composantes  $M_{\alpha\alpha}^{ij}$  en fonction des composantes  $W_{mn}^{\alpha\alpha}$ . Ainsi, en utilisant ces formules, on obtient :

$$M_{00}^{+-} = \frac{(1-T)}{T} \quad M_{00}^{-+} = -\frac{(1-T)}{T} \quad (2.229)$$

$$M_{00}^{++} = \frac{(2T-1)}{T} \quad M_{00}^{--} = \frac{1}{T} \quad (2.230)$$

$$3M_{11}^{+-} = \frac{(1-t_2)}{t_2} \quad 3M_{11}^{-+} = -\frac{(1-t_1)}{t_2} \quad (2.231)$$

$$3M_{11}^{++} = \frac{t_1+t_2-1}{t_2} \quad M_{11}^{--} = \frac{1}{t_2} \quad (2.232)$$

ce qui déterminent complètement les composantes  $M_{\alpha\alpha}^{ij}$  d'ordre zéro et un en fonction des trois paramètres fondamentaux  $T$ ,  $t_1$  et  $t_2$ . On peut remarquer que ces composantes vérifient bien les règles de somme précédemment établies.

### Equations d'interfaces macroscopiques

Pour terminer, les équations de collisions 2.219 et 2.220 peuvent être traduites en termes de grandeurs macroscopiques. Ainsi, la conservation des particules s'écrit :

$$n_R^+ = \frac{(2T-1)}{T} n_L^+ + \frac{(1-T)}{T} n_L^- \quad (2.233)$$

$$n_R^- = -\frac{(1-T)}{T} n_L^+ + \frac{1}{T} n_L^- \quad (2.234)$$

qui sont bien compatibles avec la loi de conservation :

$$n_R^+ - n_R^- = n_L^+ - n_L^- \quad (2.235)$$

La continuité du courant se traduit alors par :

$$J_R^+ = \frac{(2T-1)}{T} J_{0L}^+ + \frac{(t_1+t_2-1)}{t_2} J_{1L}^+ - \frac{(1-T)}{T} J_{0L}^- - \frac{(1-t_2)}{t_2} J_{1L}^- \quad (2.236)$$

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 58

$$J_R^- = \frac{(1-T)}{T} J_{0L}^+ + \frac{(1-t_1)}{t_2} J_{1L}^+ + \frac{1}{T} J_{0L}^- + \frac{1}{t_2} J_{1L}^- \quad (2.237)$$

et dont la somme fournit bien

$$J_R^+ + J_R^- = J_L^+ + J_L^- \quad (2.238)$$

Ainsi, les conditions d'interface 2.233, 2.234, 2.236 et 2.237 complétées par la continuité du potentiel et du champ électrique constituent un jeu de conditions d'interfaces complètement équivalent à celui présenté au paragraphe 2.3.5.

### 2.6.2 Approche mixte

Pour montrer la souplesse du formalisme, nous allons terminer ce chapitre en présentant une autre représentation possible des collisions d'interface, la représentation qu'on nommera mixte ou hybride et qui exprime les fonctions de distribution des électrons de chiralités positives en fonction de celles négatives. Dans cette représentation, les équations de collisions d'interface s'écrivent sous la forme :

$$f_R^+ = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta') f_L^-(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(\epsilon) H_{RR}(\theta, \theta') f_R^-(\theta') \quad (2.239)$$

$$f_L^+ = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(\epsilon) H_{LL}(\theta, \theta') f_L^-(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(\epsilon) H_{LR}(\theta, \theta') f_R^-(\theta') \quad (2.240)$$

où l'intégration sur l'énergie et l'angle  $\varphi$  a été effectuée.

La technique de construction des taux de transition hybride  $H_{ij}$  est très similaire à celle de la représentation du type matrice de transfert. En effet, ces fonctions sont décomposées sur les polynômes de Legendre décalés :

$$\rho(\epsilon) H_{ij}(\theta, \theta') = \sum_{\alpha=0}^{+\infty} (2\alpha+1)^2 H_{ij}^\alpha(\epsilon) P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \quad (2.241)$$

et la façon la plus directe de contraindre les coefficients  $H_{ij}^\alpha$  est de procéder comme au paragraphe précédent, c'est à dire de relier les taux  $H_{ij}$  aux taux de collisions  $W_{ij}$  de la représentation de diffusion (équations 2.217 et 2.218). Ainsi, en injectant 2.217 dans 2.239 et 2.240 dans 2.218, on constate que la compatibilité entre les conditions de bords est assurée si l'on a les relations :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta') \rho_L^+(\epsilon) W_{LL}(\theta', \theta'') = \rho_L^+(\epsilon) W_{LR}(\theta, \theta'') \quad (2.242)$$

$$\rho_R^-(\epsilon) H_{RR}(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta') \rho_R^-(\epsilon) W_{RL}(\theta', \theta'') = \rho_R^-(\epsilon) W_{RR}(\theta, \theta'') \quad (2.243)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(\epsilon) W_{LL}(\theta, \theta') \rho_L^-(\epsilon) H_{LL}(\theta', \theta'') = \delta(\cos \theta - \cos \theta'') \quad (2.244)$$

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 59

$$\rho_R^-(\epsilon) W_{RL}(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(\epsilon) W_{LL}(\theta, \theta') \rho_R^-(\epsilon) H_{LR}(\theta', \theta'') = 0 \quad (2.245)$$

qui traduites en termes de composantes deviennent :

$$(2\alpha + 1) H_{RL}^\alpha W_{LL}^\alpha = W_{LR}^\alpha \quad (2.246)$$

$$H_{RR}^\alpha + (2\alpha + 1) H_{RL}^\alpha W_{RL}^\alpha = W_{RR}^\alpha \quad (2.247)$$

$$(2\alpha + 1)^2 H_{LL}^\alpha W_{LL}^\alpha = 1 \quad (2.248)$$

$$W_{RL}^\alpha + (2\alpha + 1) H_{LR}^\alpha W_{LL}^\alpha = 0 \quad (2.249)$$

et permettent alors de déterminer toutes les composantes  $H_{ij}^\alpha$  en termes des paramètres fondamentaux  $T$ ,  $t_1$  et  $t_2$  :

$$H_{RL}^0 = \frac{T}{(1-T)} \quad H_{LL}^0 = \frac{1}{(1-T)} \quad H_{LR}^0 = -\frac{T}{(1-T)} \quad H_{RR}^0 = \frac{(1-2T)}{(1-T)} \quad (2.250)$$

$$3H_{RL}^1 = \frac{t_1}{(1-t_1)} \quad 3H_{LL}^1 = \frac{1}{(1-t_1)} \quad 3H_{LR}^1 = -\frac{t_2}{(1-t_1)} \quad 3H_{RR}^1 = 1 - \frac{t_2}{(1-t_1)} \quad (2.251)$$

Les conditions d'interfaces prennent alors la forme macroscopique :

$$n_R^+ = \frac{T}{(1-T)} n_L^- + \frac{(1-2T)}{(1-T)} n_R^- \quad (2.252)$$

$$n_L^+ = \frac{1}{(1-T)} n_L^- - \frac{T}{(1-T)} n_R^- \quad (2.253)$$

$$J_R^+ = -\frac{T}{(1-T)} J_{0L}^- - \frac{t_1}{(1-t_1)} J_{1L}^- - \frac{(1-2T)}{(1-T)} J_{0R}^- - \left(1 - \frac{t_2}{(1-t_1)}\right) J_{1R}^- \quad (2.254)$$

$$J_L^+ = -\frac{1}{(1-T)} J_{0L}^- - \frac{1}{(1-t_1)} J_{1L}^- + \frac{T}{(1-T)} J_{0R}^- + \frac{t_2}{(1-t_1)} J_{1R}^- \quad (2.255)$$

et sont équivalentes à celles établies jusqu'à présent. On notera que ces équations sont bien compatibles avec la conservation des particules entrantes et sortantes ainsi que la continuité du courant.

Pour terminer, on donne les règles de somme vérifiées par les taux de transition hybrides  $H_{ij}$  :

– La compatibilité avec l'état d'équilibre :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta') + \rho_R^-(\epsilon) H_{RR}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.256)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_L^-(\epsilon) H_{LL}(\theta, \theta') + \rho_R^-(\epsilon) H_{LR}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.257)$$

## 2.6 Complément : formulations équivalentes des effets d'interface 60

– La conservation des particules :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_L^-(\epsilon) H_{LL}(\theta, \theta') - \rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.258)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_R^-(\epsilon) H_{RR}(\theta, \theta') - \rho_R^-(\epsilon) H_{LR}(\theta, \theta')] = 1 \quad (2.259)$$

– La continuité du courant :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \cos \theta' [\rho_L^-(\epsilon) H_{RL}(\theta, \theta') - \rho_L^-(\epsilon) H_{LL}(\theta, \theta')] = -\cos \theta' \quad (2.260)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \cos \theta' [\rho_R^-(\epsilon) H_{RR}(\theta, \theta') - \rho_R^-(\epsilon) H_{LR}(\theta, \theta')] = \cos \theta' \quad (2.261)$$

qui traduites en termes de composantes s'écrivent :

$$H_{RL}^0 + H_{RR}^0 = 1 \quad H_{LL}^0 + H_{LR}^0 = 1 \quad H_{LL}^0 - H_{RL}^0 = 1 \quad (2.262)$$

$$H_{RR}^0 + H_{LR}^0 = 1 \quad 3H_{RL}^1 - 3H_{LL}^1 = -1 \quad 3H_{RR}^1 - 3H_{LR}^1 = 1 \quad (2.263)$$

et dont on constate que les expressions des composantes  $H_{ij}^\alpha$  vérifient bien ces relations.

Remarque : Si l'on pose

$$H = \frac{T}{(1-T)} \quad 3H_{RL}^1 = h_1 \quad 3H_{LR}^1 = h_2 \quad (2.264)$$

alors toutes les autres composantes sont déterminées par ces paramètres puisque :

$$H_{RR}^0 = 1 - H \quad H_{LL}^0 = 1 + H \quad H_{LR}^0 = -H \quad H_{RL}^0 = H \quad (2.265)$$

$$3H_{LL}^1 = 1 + h_1 \quad 3H_{RR}^1 = 1 + h_2 \quad (2.266)$$

montrant ainsi que quelque soit la représentation, il y a toujours trois paramètres fondamentaux.

## Chapitre 3

# Quelques conséquences du modèle collisionnel

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Représentation en terme de potentiel électrochimique</b>	<b>61</b>
<b>3.2</b>	<b>Résistance deux terminaux . . . . .</b>	<b>67</b>
<b>3.3</b>	<b>Transport non local . . . . .</b>	<b>72</b>
<b>3.4</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>81</b>

---

Dans ce chapitre, nous présentons quelques conséquences du modèle macroscopique développé au chapitre précédent. Nous commencerons par introduire une représentation du modèle collisionnel en termes de potentiels électrochimiques chiraux. Nous présentons ensuite les corrections de libre parcours à la résistance deux terminaux d'un multicouche. Enfin, nous terminons par l'application du modèle collisionnel sur des cas simples de transport non local permettant ainsi de mettre en évidence le rôle du libre parcours moyen et des réservoirs pour ce type de transport particulier.

## 3.1 Représentation en terme de potentiel électrochimique

### 3.1.1 Introduction

Le modèle macroscopique (appelé modèle collisionnel) dérivé au chapitre précédent fournit une description du transport en termes de grandeurs moyennes chirales. Les équations de transport de volume et les conditions de réservoirs et d'interface permettent d'accéder aux profils des accumulations chirales  $n^\pm(x)$ , des courants anisotropes  $J_1^\pm(x)$  et des grandeurs électriques comme la résistivité électrique  $\rho(x)$ . En particulier, cette dernière permet de calculer la résistance (deux terminaux) d'un multicouche quelconque. En effet, en suivant les définitions classiques des circuits électriques ([241] et la figure 3.1), la résistance électrique d'un matériau est définie comme le rapport entre la différence de potentiel appliquée à ses bornes ( $V_1 - V_2$ ) et le courant circulant en son sein  $I$  (la loi d'Ohm) :

$$R = \frac{V_1 - V_2}{I} \quad (3.1)$$

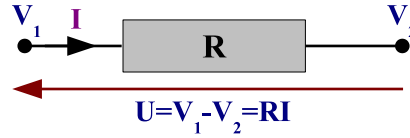


FIGURE 3.1 – Convention de la loi d'Ohm.

et cette résistance est alors fournie par l'intégrale de la résistivité sur toute la structure :

$$R = \frac{1}{S} \int dx \rho(x) \quad (3.2)$$

où  $S$  est la section transverse (perpendiculaire à l'axe des  $x$ ) du matériau.

Ainsi, grâce à la prise en compte des effets d'écrantage, le calcul de la résistance par la relation 3.2 est rendue possible. Cependant, en parcourant la littérature, on s'aperçoit que les différents modèles de transport existant (par exemple [60], [248], [249], [19], [102] ou encore [103] ainsi que tous les modèles de transport relatifs au spin [65] à [74]) n'utilisent pas la notion de résistivité pour étudier le transport mais font appel à une autre grandeur : le potentiel électrochimique. En particulier, ces modèles ne traitant pas les effets d'écrantage, il n'est donc pas possible de définir de résistivité locale et les résistances sont déterminées par la connaissance des potentiels électrochimiques qui sont donc nécessairement indépendant de la longueur d'écran. Dans cette partie, nous allons montrer que le modèle collisionnel peut être exprimé en termes de potentiels électrochimiques sous certaines conditions relativement pertinentes pour les métaux. L'intérêt de cette nouvelle représentation est qu'elle permet d'absorber complètement les effets d'écrantage électrostatique et de simplifier les calculs sans affecter pour autant la physique. Nous commençons par exprimer le modèle collisionnel en terme de potentiels électrochimiques chiraux puis nous ferons le même travail pour le modèle dérive-diffusion.

### 3.1.2 Expression du modèle collisionnel en fonction du potentiel électrochimique

Pour le modèle dérive-diffusion, le potentiel électrochimique  $\bar{\mu}$  a été définie à partir des profils de potentiel et d'accumulation par la relation (voir 2.37) :

$$\mu(x) = V(x) + \frac{D}{\sigma_d} n(x) \quad (3.3)$$

Le modèle collisionnel étant chirale, il est donc naturelle d'étendre cette définition en introduisant des potentiels électrochimiques chiraux  $\mu^\pm$  :

$$\mu^\pm(x) = V(x) + \frac{2D}{\sigma_d} n^\pm(x) \quad (3.4)$$

Le potentiel électrochimique global est alors fourni par la relation :

$$\mu(x) = \frac{1}{2} (\mu^+(x) + \mu^-(x)) \quad (3.5)$$



Avec ces définitions, on constate que les équations de transport chirales 2.71 à 2.75 s'écrivent naturellement en terme des potentiels électrochimiques chiraux :

$$\frac{\partial \mu^\pm}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{(\mu^- - \mu^+)}{\ell} + \frac{4}{\sigma_d} J_1^\pm \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial J^\pm}{\partial x} \pm \frac{3}{\ell} J_1^\pm = \frac{\sigma_d}{2D} \frac{(\mu^\pm - \mu^\mp)}{4\tau} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda_{TF}^2} V = -\frac{1}{\lambda_{TF}^2} \frac{(\mu^+(x) + \mu^-(x))}{2} \quad (3.8)$$

Ces équations montrent en particulier que les potentiels électrochimiques chiraux  $\mu^\pm$  et les composantes anisotropes du courant  $J_1^\pm$  ne sont couplés qu'entre eux. Le potentiel électrique est alors déterminé, après coup, par la connaissance du potentiel électrochimique global  $\mu$ . Cet aspect, caractéristique du régime linéaire à déjà été rencontré dans d'autres approches (par exemple [48]).

A partir des potentiels électrochimiques chiraux et des courants anisotropes, la densité de courant de charge est obtenue par la relation :

$$J_c = \frac{(\mu^+ - \mu^-)}{SR_{sh}} + J_1^+ + J_1^- \quad (3.9)$$

où  $S$  désigne la section transverse du circuit et  $R_{sh}$  désigne la résistance de Sharvin ([20],[21]) :

$$R_{sh} = \frac{h}{2e^2 M} \quad M = \frac{k_f^2 S}{4\pi} \quad (3.10)$$

Dans cette expression,  $k_f$  est le vecteur d'onde de Fermi,  $h$  la constante de Planck et  $e$  la charge élémentaire. La grandeur  $M$  est appelé nombre de canaux ([248], [245]).

En utilisant les expressions des grandeurs macroscopiques du paragraphe 2.2.5, les potentiels électrochimiques chiraux et les courants anisotropes s'écrivent :

$$\mu^\pm(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \frac{\lambda_5}{2} \pm \frac{1}{2} - \frac{x}{\ell} \mp \frac{1}{4\sqrt{12}} \left( (2 \pm \sqrt{12}) \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - (2 \mp \sqrt{12}) \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (3.11)$$

$$J_1^\pm(x) = \frac{J_c}{8} \left[ 1 \pm \lambda_1 \left( 1 \pm \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \pm \lambda_2 \left( 1 \mp \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right] \quad (3.12)$$

où on a introduit l'intensité du courant  $I = J_c S$  et utilisé la relation  $\frac{\ell}{\sigma_d} = \frac{3}{4} SR_{sh}$ . On constate en particulier que ces grandeurs ne font intervenir que le libre parcours moyen comme longueur de décroissance. Le potentiel électrochimique global est alors donné par l'expression :

$$\mu(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} - \frac{1}{4} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (3.13)$$

Si les équations de transport de volume s'écrivent naturellement en terme des potentiels électrochimiques, ceci est moins immédiat pour les conditions

d'interface. En effet, les conditions d'interface du modèle collisionnel (présentée au paragraphe 2.3.5) font intervenir les accumulations chirales. Ainsi, pour les exprimer en fonctions des potentiels chiraux, il suffit d'utiliser la définition 3.4 pour exprimer les accumulations en fonctions des potentiels électrochimiques. En injectant alors cette relation dans les conditions d'interfaces, on constate que celles-ci ne sont pas autonomes en potentiels électrochimiques et courants anisotropes puisqu'elles font intervenir la valeur du potentiel électrique à l'interface. Cette dépendance avec le potentiel électrique provient du fait que le rapport  $\frac{D}{\sigma_d}$  intervenant dans la définition du potentiel électrochimique est différent d'une couche à l'autre. Toutefois, il est intéressant de noter que ce rapport vérifie la relation d'Einstein :

$$\frac{D}{\sigma_d} = \frac{1}{e^2 \rho(\epsilon_f)} \quad (3.14)$$

où  $\rho(\epsilon_f)$  est la densité d'état à l'énergie de Fermi. Ainsi, si l'on suppose la même densité d'état pour chaque couche, hypothèse très raisonnable pour les métaux, la dépendance des conditions d'interface vis-à-vis du potentiel électrique disparaît et les équations d'interface deviennent autonomes en potentiels électrochimiques et courants anisotropes. En particulier, cette hypothèse revient à supposer la même vitesse de Fermi pour chaque couche (ou encore une résistance de Sharvin identique) ce qui entraîne que les conditions d'interface sont découplées en potentiels et en courants :

$$\mu_L^- = (1 - T) \mu_L^+ + T \mu_R^+ \quad (3.15)$$

$$\mu_R^+ = (1 - T) \mu_R^- + T \mu_L^- \quad (3.16)$$

$$J_{1R}^+ = t_1 J_{1L}^+ - (1 - t_2) J_{1R}^- \quad (3.17)$$

$$J_{1L}^- = t_2 J_{1R}^- - (1 - t_1) J_{1L}^+ \quad (3.18)$$

En particulier, la transmission isotrope  $T$  affecte les potentiels électrochimiques chiraux alors que les transmissions anisotropes  $t_{1,2}$  affectent les courants anisotropes. Il y a donc conservation séparée de  $\delta = \mu^+ - \mu^-$  et  $J_1 = J_1^+ + J_1^-$  à la traversée de l'interface.

Contrairement aux conditions d'interface, les relations de connexion aux réservoir s'expriment naturellement en termes des potentiels électrochimiques chiraux :

$$\mu^+ = V_1 \quad J_1^+ = 0 \quad (3.19)$$

$$\mu^- = V_2 \quad J_1^- = 0 \quad (3.20)$$

où  $V_1$  et  $V_2$  sont les valeurs du potentiel électrique aux bornes de la structure.

Ainsi, au cours de ce paragraphe, nous avons établi une représentation des équations de transport, d'interface et de connexion aux réservoirs du modèle collisionnel en terme de potentiels électrochimiques chiraux en adoptant l'hypothèse, très raisonnable pour les métaux, de la constance de la densité d'état à l'énergie de Fermi d'une couche à l'autre. Cette formulation a l'avantage de simplifier les calculs en mettant au second plan le potentiel électrique qui n'est plus qu'un sous produit des potentiels électrochimiques chiraux. En particulier, il est

utile de noter que pour un métal, il existe très peu de différence entre le potentiel électrique et le potentiel électrochimique global. Cette propriété peut être mise en lumière à partir de l'équation de Poisson 3.8 dans laquelle la coordonnée d'espace  $x$  est adimensionnée par le libre parcours moyen ( $x = \ell X$ ) :

$$\left(\frac{\lambda_{TF}}{\ell}\right)^2 \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} - V(X) = -\mu(X) \quad (3.21)$$

Sachant que pour un métal, la longueur d'écran est de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi (typiquement 0.1 nm) et que le libre parcours moyen varie autour de 1 à 10 nm, le rapport  $\frac{\lambda_{TF}}{\ell}$  est donc petit et ce d'autant plus qu'il est élevé au carré. Le terme de dérivée seconde peut donc être négligé ce qui fournit l'égalité :

$$V(X) = \mu(X) \quad \frac{\lambda_{TF}}{\ell} \rightarrow 0 \quad (3.22)$$

Ainsi, le profil de potentiel électrique suit celui du potentiel électrochimique global dans la limite où la constante d'écran est infiniment petite devant le libre parcours moyen. Cela signifie donc que le potentiel électrique ne diffère du potentiel électrochimique qu'au voisinage des interfaces, sur une zone d'extension spatiale la longueur d'écran (ou  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\lambda_{TF}^2}$ ). Cette caractéristique provient de la petitesse de la longueur d'écran dans un métal et a été mis en évidence par des approches quantiques ([14], [16], [17] et [48]). Grâce à celle-ci, l'étude du transport peut donc se faire sans l'introduction du potentiel électrique et nous verrons dans la suite comment exprimer la résistance d'une structure en fonction des potentiels électrochimiques chiraux.

Remarque : Il est intéressant de noter la hiérarchie s'opérant entre le potentiel électrique  $V$ , le potentiel électrochimique  $\mu$  et le potentiel généralisé  $\phi$  dont nous rappelons les différentes expressions :

$$V(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} + \frac{\eta^2}{4(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (3.23)$$

$$\mu(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} - \frac{1}{4} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) \right] \quad (3.24)$$

$$\phi(x) = \mu(x) - \frac{\ell^2}{12} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \frac{\lambda_5}{2} - \frac{x}{\ell} \right] \quad (3.25)$$

où  $\eta = \frac{\ell}{\lambda_{TF}}$ . On constate que le potentiel électrique ( $V$ ) évolue sur deux longueurs, le libre parcours moyen et la longueur d'écran, le potentiel électrochimique ( $\mu$ ) ne fait intervenir que le libre parcours moyen et le potentiel généralisé ( $\phi$ ) ne contient plus de termes exponentielles. On obtient ainsi un développement multi-échelles et le passage d'un potentiel à l'autre s'obtient par un processus de limite permettant l'élimination d'une longueur :

- le passage du potentiel électrique au potentiel électrochimique suppose une longueur d'écran infiniment petite par rapport au libre parcours moyen :

$$V(x) = \mu(x) \quad \text{si} \quad \eta = \frac{\ell}{\lambda_{TF}} \rightarrow \infty \quad (3.26)$$

- le passage du potentiel électrochimique au potentiel généralisé s'obtient en supposant que le libre parcours moyen est beaucoup plus petit que l'épaisseur ( $\Delta$ ) des couches :

$$\mu(x) = \phi(x) \quad \text{si} \quad \kappa = \frac{\ell}{\Delta} \rightarrow 0 \quad (3.27)$$

### 3.1.3 Expression du modèle dérive-diffusion en fonction du potentiel électrochimique

De la même façon que le modèle collisionnel, le modèle dérive-diffusion peut être exprimé en fonction du potentiel électrochimique (voir 2.37) :

$$\mu(x) = V(x) + \frac{D}{\sigma_d} n(x) \quad (3.28)$$

En particulier, les équations de transport s'écrivent naturellement en terme de cette grandeur :

$$J_c = -\sigma_d \frac{\partial \mu}{\partial x} \quad \frac{\partial J_c}{\partial x} = 0 \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda_{TF}^2} V = -\frac{\mu(x)}{\lambda_{TF}^2} \quad (3.30)$$

En utilisant les notations du paragraphe 2.1.3, le potentiel électrochimique s'écrit sous la forme :

$$\mu(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \left[ \delta_3 - \frac{x}{\ell} \right] \quad (3.31)$$

et varie linéairement avec la position.

Pour obtenir une condition d'interface autonome en potentiel électrochimique à partir des conditions du paragraphe 2.4.3, il faut utiliser la même hypothèse que précédemment, à savoir que la densité d'état à l'énergie de Fermi varie peu d'un métal à l'autre. Celle-ci prend alors la forme :

$$\mu_L - \mu_R = R_{sh} \frac{R}{T} I \quad (3.32)$$

Cette condition ressemble fortement à celle que l'on trouve dans les circuits theory [64].

Les conditions de connexion aux réservoirs peuvent être écrites en termes de potentiels électrochimiques sous une forme identique à celles dérivées dans [20] et [21] à partir d'une approche quantique utilisant la théorie des matrices aléatoires continues :

$$\bar{\mu} + \frac{R_{sh}}{2} I = V_1 \quad \bar{\mu} - \frac{R_{sh}}{2} I = V_2 \quad (3.33)$$

où l'on a introduit la résistance de Sharvin  $R_{sh} = \frac{4\pi\hbar}{e^2 k_F^2 S}$  et  $I = J_c S$  l'intensité du courant ( $S$  est la section transverse du circuit).

Ainsi, cette représentation du modèle dérive-diffusion permet, comme pour le modèle collisionnel, d'étudier les propriétés de transport d'une structure sans faire appel au potentiel électrique. En particulier, le lien établi précédemment entre les potentiels électrique et électrochimique restent également vrai dans la limite dérive-diffusion.

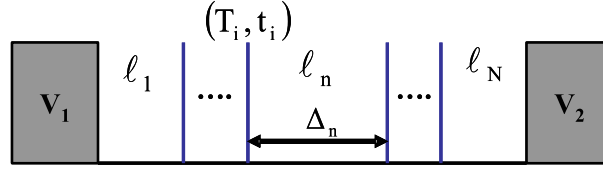


FIGURE 3.2 – Représentation d’une structure constituée de  $N$  matériaux. Chaque couche est caractérisée par son épaisseur  $\Delta_i$  et son libre parcours moyen  $\ell_i$ . Les  $N - 1$  interfaces sont décrites par leur transmission isotrope  $T$  et anisotrope  $t$  ( $t_1 = t_2 = T$ ). L’épaisseur de la structure,  $L$ , est donnée par la somme des épaisseurs des couches  $L = \sum_{n=1}^N \Delta_n$ . La structure est connectée à ses extrémités à deux réservoirs, positionnés en  $x = 0$  et  $x = L$  imposant une différence de potentiel électrique  $V_1 - V_2$ .

## 3.2 Résistance deux terminaux

A partir de la représentation du modèle collisionnel en terme des potentiels électrochimiques chiraux, il est possible de mettre en évidence des propriétés très générales sur la résistance deux terminaux d’un multicouche. Nous commencerons par donner la structure générale de cette résistance puis nous présenterons des illustrations simples de cette formule.

### 3.2.1 Expression générale de la résistance deux terminaux

Considérons la structure multicouche de la figure 3.2. Celle-ci est constituée de  $N$  couches, caractérisées par une épaisseur  $\Delta$  et un libre parcours moyen  $\ell$  et séparées par  $N - 1$  interfaces paramétrées par une transmission isotrope  $T$  et anisotrope<sup>1</sup>  $t$ . L’épaisseur globale,  $L$ , de la structure est alors fournie par la somme des épaisseurs individuelles de chaque couche :

$$L = \sum_{n=1}^N \Delta_n \quad (3.34)$$

Le multicouche est connecté à ses extrémités à deux réservoirs, positionnés en  $x = 0$  et  $x = L$ , imposant une différence de potentiel électrique  $V_1 - V_2$ .

A partir des potentiels électrochimiques chiraux, la résistance de cette structure est fournie par la différence des conditions de réservoirs. En effet, en effectuant la différence des conditions de connexion aux réservoirs 3.19 et 3.20 relatives aux potentiels électrochimiques, on obtient :

$$\mu_1^+(0) - \mu_N^-(L) = V_1 - V_2 \quad (3.35)$$

où  $\mu_1^+(0)$  et  $\mu_N^-(L)$  sont respectivement les valeurs des potentiels électrochimiques des électrons entrants dans la structure. D’autre part, à partir des expressions 3.11, on remarque que les potentiels chiraux peuvent être mis sous la forme symbolique :

$$\mu^\pm(x) = \frac{3}{4} R_{sh} I \Gamma^\pm(x) \quad (3.36)$$

1. On suppose  $t_1 = t_2 = t$

où la définition des fonctions  $\Gamma^\pm(x)$  est relativement transparente. Ainsi, en combinant ces deux dernières relations, la résistance électrique est fournie par l'expression :

$$R_2 = \frac{3}{4} R_{sh} (\Gamma_1^+(0) - \Gamma_N^-(L)) \quad (3.37)$$

qui permet ainsi d'obtenir la résistance électrique à partir de la connaissance des potentiels électrochimiques. En particulier, celle-ci est indépendante de la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi et est identique à celle que l'on obtiendrait en utilisant la formule<sup>2</sup> habituelle 3.2.

En manipulant la relation générale 3.37, on peut alors montrer que cette résistance est la somme de trois contributions :

$$R_2 = R_{sh} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{R_n}{T_n} + \frac{3}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\Delta_n}{\ell_n} + \Lambda(\{T_n\}, \{t_n\}, \{\kappa_n\}) \right] \quad (3.38)$$

La première contribution :

$$R_{sh} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{R_n}{T_n} \right] \quad (3.39)$$

représente la résistance de la structure dans une limite balistique  $\ell = \infty$ . Celle-ci provient des effets d'interface par l'intermédiaire du coefficient de transmission isotrope ( $R_n = 1 - T_n$ ) et est identique à celle obtenue par le formalisme de Landauer-Buttiker dans le régime incohérent ([248]).

La seconde contribution, dite diffusive :

$$\frac{3}{4} R_{sh} \sum_{n=1}^N \frac{\Delta_n}{\ell_n} \quad (3.40)$$

varie linéairement avec l'épaisseur des couches et représente le terme ohmique de Drude, produit de la résistivité de volume  $\rho_d$  par l'épaisseur de la couche :

$$\frac{3}{4} R_{sh} \sum_{n=1}^N \frac{\Delta_n}{\ell_n} = \frac{1}{S} \sum_{n=1}^N \rho_{dn} \Delta_n \quad (3.41)$$

où l'on a utilisé la relation 3D ([245]) :

$$\rho_d = \frac{3}{4} \frac{R_{sh} S}{\ell} = \frac{m v_f}{e^2 n_0 \ell} \quad (3.42)$$

S étant la section transverse du circuit.

La somme de ces deux contributions sera appelée résistance série et notée  $R_s$  et correspond à la mise en série des effets balistiques (caractéristiques des interfaces) et diffusifs (caractéristiques de la physique de volume) :

$$R_s = R_{sh} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{R_n}{T_n} + \frac{3}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\Delta_n}{\ell_n} \right] \quad \kappa_n = \frac{\ell_n}{\Delta_n} \quad (3.43)$$

<sup>2</sup> sous réserve des hypothèses qui ont permis d'établir la représentation en terme de potentiel électrochimique.

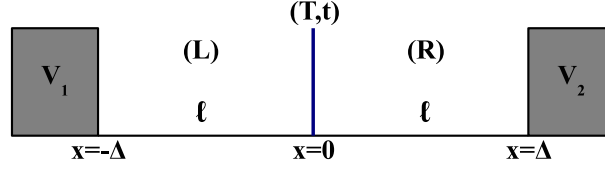


FIGURE 3.3 – La structure bicouche utilisée pour présenter les corrections de libre parcours moyen.

En particulier, cette résistance correspond à celle que l'on obtiendrait en utilisant le modèle dérive-diffusion.

La dernière contribution, caractéristique des chiralités, représente donc les corrections de libre parcours moyen à la résistance deux terminaux :

$$R_{sh}\Lambda(\{T_n\}, \{t_n\}, \{\kappa_n\}) \quad (3.44)$$

Celle-ci dépend de tous les coefficients de transmission isotropes et anisotropes des interfaces et varie exponentiellement avec l'épaisseur des couches. Cette contribution qui n'est pas contenue dans le modèle dérive-diffusion et caractéristique du modèle collisionnel.

Ainsi, la formule 3.38 varie continûment de sa valeur balistique 3.39 à sa valeur diffusive 3.41 lorsqu'on fait varier le libre parcours moyen. En particulier, la résistance s'écrit comme la somme de la résistance série  $R_s$  (3.43) et des corrections de libre parcours moyen :

$$R_2 = R_s + R_{sh}\Lambda(\{T_n\}, \{t_n\}, \{\kappa_n\}) \quad (3.45)$$

Nous allons maintenant donner quelques exemples de corrections de libre parcours moyen.

### 3.2.2 Quelques illustrations simples

La fonction  $\Lambda$  caractéristique des corrections de libre parcours moyen est un terme relativement compliqué qui varie exponentiellement avec l'épaisseur des couches et dépend des deux types de coefficients de transmission. En particulier, on peut remarquer que la transmission isotrope n'intervient que dans les corrections de libre parcours moyen. Pour présenter ces corrections, nous considérons la structure bicouche de la figure 3.3. Celle-ci est constituée de deux matériaux identiques, de même épaisseur et séparés par une interface positionnée en  $x = 0$ . Cette structure très simple permet de mettre en évidence les principales effets liées aux corrections de libre parcours moyen.

Pour mettre en évidence les effets de libre parcours moyen, nous considérons différents cas :

- Cas  $T = t = 1$  : dans ce cas, l'interface est parfaite et n'oppose aucune résistance au courant. On obtient donc une couche unique d'épaisseur  $2\Delta$ .

La résistance deux terminaux prend alors la forme simple :

$$R_2(T = t = 1) = R_{sh} \left[ 1 + \frac{3}{4\kappa} + \frac{\sqrt{12}}{8} \frac{\left(1 - e^{-\frac{\sqrt{12}}{\kappa}}\right)}{\left[(3 + \sqrt{12}) + (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{\sqrt{12}}{\kappa}}\right]} \right] \quad (3.46)$$

dans laquelle on a introduit le nombre de Knudsen  $\kappa = \frac{\ell}{2\Delta}$ . Dans cette expression, les corrections de libre parcours moyen prennent la forme :

$$\Lambda(\kappa, T = t = 1) = \frac{\sqrt{12}}{8} \frac{\left(1 - e^{-\frac{\sqrt{12}}{\kappa}}\right)}{\left[(3 + \sqrt{12}) + (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{\sqrt{12}}{\kappa}}\right]} \quad (3.47)$$

et sont simplement générés par un effet de taille finie. On peut vérifier sur la figure 3.4 que ces corrections sont relativement faibles comparées à la résistance série :

$$R_s = R_{sh} \left[ 1 + \frac{3}{4\kappa} \right] \quad (3.48)$$

- Cas  $t = 1$  : dans ce cas, l'interface ajoute de la résistance via le coefficient de transmission isotrope  $T$ . La résistance prend maintenant la forme :

$$R_2(t = 1) = R_{sh} \left[ \frac{1}{T} + \frac{3}{4\kappa} + \Lambda(\Delta, \ell, T) \right] \quad (3.49)$$

où les corrections sont données par :

$$\Lambda(\Delta, \ell, T) = \Lambda(\kappa, T = t = 1) - \frac{R}{T} \frac{\left[ (3 + \sqrt{12}) + (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{\Delta\sqrt{12}}{\ell}} - 6e^{-\frac{\Delta\sqrt{12}}{2\ell}} \right]}{3 \left[ (3 + \sqrt{12}) + (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{\Delta\sqrt{12}}{\ell}} \right]} \quad (3.50)$$

et résulte de la somme des corrections de taille finie (3.47) et d'une nouvelle contribution, négative, résultant de l'association entre les effets d'interface et d'épaisseur finie. La résistance série est fournie par la relation :

$$R_s = R_{sh} \left[ \frac{1}{T} + \frac{3}{4\kappa} \right] \quad (3.51)$$

On constate que la nouvelle correction tend à diminuer la résistance de la structure. En particulier, en introduisant la quantité :

$$\frac{R_2 - R_s}{R_s} \quad (3.52)$$

qui permet de mieux visualiser les corrections de libre parcours moyen, on constate qu'elle présente des extremums en fonctions du nombre de Knudsen lorsqu'on fait varier le coefficient de transmission isotrope  $T$  (figure 3.5 (a)). Ces extremums proviennent du changement de signe des corrections et on constate qu'ils apparaissent au voisinage de la transition entre les régimes balistique et diffusif ( $\kappa \approx 1$ ) et qu'ils sont d'autant plus important que la transmission isotrope  $T$  est faible.



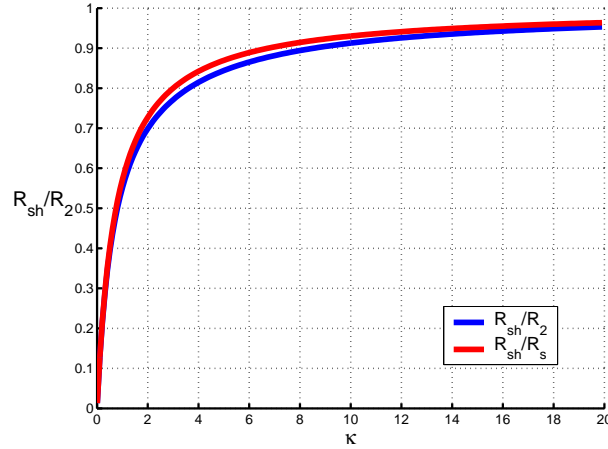


FIGURE 3.4 – Pour mieux faire apparaître les différences entre  $R_2$  et  $R_s$ , cette courbe fournit l'évolution du rapport  $\frac{R_2}{R_{sh}}$  lorsque  $T = t = 1$  en fonction du nombre de Knudsen. On constate que la résistance (courbe bleue, équation 3.46) est toujours bien approximée par la mise en série des effets balistiques et diffusifs (courbe rouge, formule 3.48).

- Cas  $T = 1, t < 1$  : pour ce cas, les corrections prennent une forme compliquée et nous présentons sur la figure 3.5 (b) l'évolution du rapport 3.52 en fonction du nombre de Knudsen pour différentes valeurs de la transmission anisotrope  $t$ . Dans ce cas, la résistance présente des maximums au voisinage de la transition balistique-diffusif qui sont d'autant plus grand que la transmission anisotrope est faible.

Nous voyons donc que les corrections de libre parcours moyen, générés par les effets d'interface et de taille finie, engendrent des extremums de la résistance au voisinage de la transition balistique-diffusif. Si ces effets produisent une augmentation ou une diminution de la résistance pouvant atteindre une quinzaine de pourcent (figure 3.5), la résistance est toujours bien approximée par le terme série  $R_s$  conformément à [23].

Pour terminer, la figure 3.6 présentent les profils de potentiel électrique  $V$ , électrochimique  $\mu$  et généralisé  $\phi$  en fonction de la coordonnée  $\frac{x}{\Delta}$  pour deux nombres de Knudsen dans le cas de la bicouche 3.3. Conformément aux arguments de la section précédente, on constate que le potentiel électrique suit celui du potentiel électrochimique sauf au voisinage des bords et de l'interface. De plus, lorsque l'épaisseur des couches est plus grande que le libre parcours moyen, on observe qu'il existe très peu de différences entre ces trois potentiels en volume des couches. Notons qu'au niveau de l'interface, le potentiel électrique ( $V$ ) est toujours continue<sup>3</sup>, le potentiel électrochimique ( $\mu$ ) est continue si  $T = 1$  et le potentiel généralisé ( $\phi$ ) l'est lorsque l'interface est parfaite  $T = t = 1$ .

3. par construction.

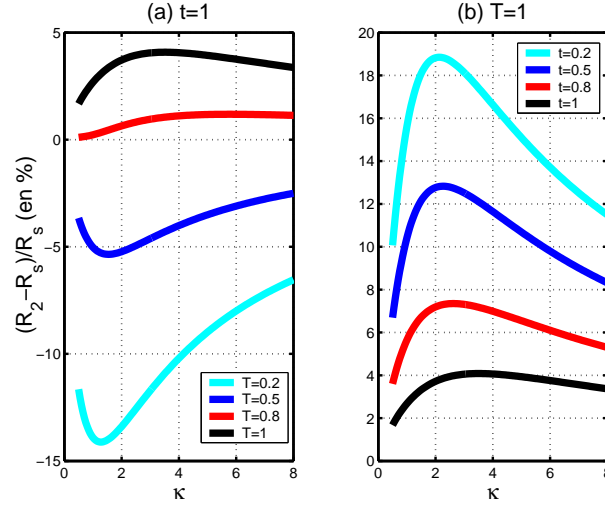


FIGURE 3.5 – Evolution du rapport 3.52 en fonction du nombre de Knudsen pour (a) différentes valeurs du coefficient de transmission isotrope  $T$  et (b) différentes valeurs du coefficient anisotrope  $t$ . Ce rapport présente des extremums au voisinage de la transition balistique-diffusif et qui sont engendrés par les corrections de libre parcours moyen. Dans les deux cas, la courbe noire présente les corrections de taille finie (interface parfaite).

### 3.3 Transport non local

#### 3.3.1 Introduction

Jusqu'à présent, nous avons étudié les propriétés résistives de structures composées d'un assemblage de plusieurs couches dans lesquelles circulaient une densité de courant ( $J_c$ ) uniforme. On peut constater que les effets de libre parcours moyen capturés par le modèle collisionnel restent faibles comparés à ceux obtenus à partir du modèle moins détaillé que constitue dérive-diffusion. En particulier, la conductance deux fils est toujours dominée par le terme ohmique (proportionnel à l'épaisseur de la couche) effaçant le terme dépendant exponentiellement de l'épaisseur de la couche. Une question assez naturelle apparaît alors : existe-t'il une situation dans laquelle la contribution exponentielle soit dominante ?

On peut montrer que la présence du terme ohmique est étroitement associée à l'existence d'un courant dans la structure. Ainsi, si ce courant s'annule, la contribution linéaire disparaît laissant ainsi s'exprimer la dépendance exponentielle. Cependant, si on se limite au seule géométrie CPP, la condition d'annulation du courant ainsi que la connexion à des réservoirs en équilibre thermodynamique imposent alors l'annulation des parties hors-équilibre des grandeurs physiques, il n'y a donc aucun transport. Ainsi, pour observer un état hors-équilibre sans courant nette de charge  $J_c = 0$ , il faut se tourner vers les géométries non locales et faire du transport non local.

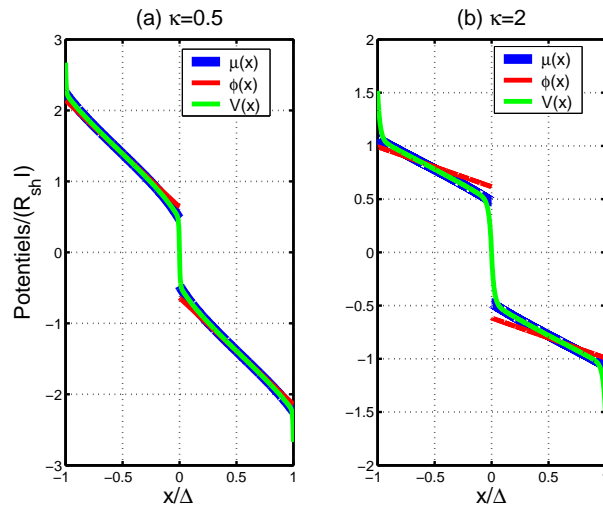


FIGURE 3.6 – Tracé des profils de potentiel électrique (courbe verte), de potentiel électrochimique (courbe bleue) et de potentiel généralisé (courbe rouge) en fonction de la position adimensionnée par l'épaisseur  $\Delta$  et pour deux nombres de Knudsen. On constate que le potentiel électrique suit le profil de potentiel électrochimique sauf au voisinage des différentes interfaces. Lorsque l'épaisseur est plus grande que le libre parcours moyen (figure (a)), il y a très peu de différences entre les trois potentiels en volume de la structure. L'origine du potentiel électrique a été choisi au niveau de l'interface. Les transmissions valent  $T = 0.5$  et  $t = 0.2$ . Les potentiels sont adimensionnés par le produit de la résistance de Sharvin  $R_{sh}$  et de l'intensité du courant  $I$ .

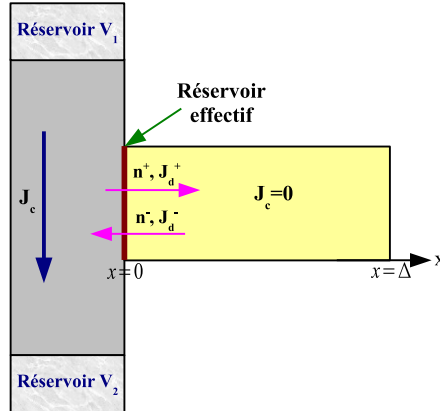


FIGURE 3.7 – Exemple de géométrie non locale. Un barreau est connecté perpendiculairement à un matériau dans lequel circule un courant de charge  $J_c$ . Au sein du barreau, aucun courant ne circule. De façon effective, le matériau parcouru par un courant agit comme un réservoir injectant des électrons dans un état hors-équilibre et générant ainsi un état hors-équilibre sans courant au sein du barreau. Le barreau étant composé d'un seul matériau, on parlera de transport non local monocouche.

Une géométrie non locale (voir l'exemple de la figure 3.7) est un assemblage non colinéaire de matériaux, c'est à dire que les matériaux ne sont pas assemblés dans la continuité (comme dans la géométrie CPP) mais possède des ramifications. Le transport non local consiste alors à injecter du courant dans une certaine portion du circuit et à mesurer une différence de potentiel entre deux zones dans lequel le courant ne circule pas. Pour comprendre les choses, considérons l'exemple de la figure 3.7. Un barreau<sup>4</sup> est connecté perpendiculairement à un matériau dans lequel circule un courant de charge  $J_c$ . D'un point de vue électrique, le barreau constituant un circuit ouvert, aucun courant électrique ne circule en son sein. Le matériau parcouru par un courant étant dans un état hors-équilibre, il induit alors un état hors-équilibre sans courant à l'intérieur du barreau. En effet, il faut comprendre que si le courant de charge circule bien de haut en bas, microscopiquement les électrons peuvent se propager de droite à gauche. Ainsi, des électrons hors-équilibre entrent et sortent du barreau générant alors une situation hors équilibre dans celui-ci. C'est donc la proximité avec une zone hors-équilibre qui crée cet état hors-équilibre sans courant. En particulier, le matériau parcouru par le courant de charge agit comme un réservoir effectif pour le barreau. La différence étant que maintenant les électrons injectés ne sont plus dans un état d'équilibre thermodynamique mais possède une nouvelle statistique.

Dans cette dernière partie, nous allons présenter une façon de traiter ces effets non locaux à l'aide du modèle collisionnel. Nous commencerons par donner les expressions des grandeurs macroscopiques en l'absence de courant de

4. On conservera cette dénomination pour caractériser les régions dans lequel le courant ne circule pas.

charge ainsi que les conditions de réservoirs permettant d'étudier la physique du barreau. Nous traiterons ensuite deux cas, celui du barreau monocouche et le cas du barreau bicouche. Il faut noter que nous allons présenter **des résultats de principes** dans la mesure où pour comprendre réellement ce type de transport, il faudrait résoudre simultanément la physique du barreau ainsi que celle du matériau parcouru par le courant et qui ne correspond plus à celle d'une géométrie monodimensionnelle. Notre objectif est double puisque nous voulons montrer d'une part que le transport non local, souvent associé avec du transport polarisé en spin ([106] à [109]), existe pour le transport de charge et d'autre part, que les effets prédits sont caractéristiques du modèle collisionnel puisque le modèle dérive-diffusion ne permet pas de les restituer.

### 3.3.2 Grandeurs macroscopiques en l'absence de courant

Les expressions des grandeurs macroscopiques présentées au paragraphe 2.2.5 sont caractéristiques de la présence d'un courant de charge non nul. En l'absence de courant, elles doivent être modifiées et les solutions des équations de transport 2.71 à 2.76 s'écrivent dans ce cas :

$$n^\pm(x) = \frac{3en_0}{4} \left[ -\mp \lambda_1 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} \pm \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \pm \lambda_2 \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} \mp \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (3.53)$$

$$J_1^\pm(x) = \frac{en_0v_f}{16} \left[ \lambda_1 \left( 1 \pm \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 \left( 1 \mp \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right] \quad (3.54)$$

$$V(x) = \frac{\epsilon_f}{e} \left[ \frac{\lambda_3}{2} + \frac{\eta^2}{4(12-\eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (3.55)$$

$$E(x) = \frac{\epsilon_f}{e\lambda_{TF}} \left[ \frac{\eta}{4(12-\eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} - \lambda_2 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right) + \beta_1 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (3.56)$$

où  $n_0$  est la densité d'équilibre,  $v_f$  la vitesse de Fermi,  $\epsilon_f$  l'énergie de Fermi et  $e$  la charge électrique de l'électron.

Ces profils décrivent donc une situation hors-équilibre en l'absence de courant électrique. On pourra remarquer en particulier que la nullité du courant entraîne la relation :

$$J_1^+(x) + J_1^-(x) = -\frac{v_f}{2} (n^+(x) - n^-(x)) \quad (3.57)$$

en tout point de la structure. Il y a donc équivalence entre courant anisotrope et courant isotrope.

Pour que les profils des grandeurs moyennes soient univoquement déterminés, il faut, comme de coutume, déterminer les différentes constantes d'intégration ( $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ ,  $\beta_1$  et  $\beta_2$ ) en spécifiant des conditions de raccordements aux bords de la structure. Notons tout de suite que si le barreau est constitué de plusieurs matériaux, les conditions de raccordement aux interfaces sont identiques à celles utilisées en présence d'un courant de charge puisque les lois de conservation et

la description microscopique dont elles découlent restent invariantes de forme (même la conservation du courant). Ainsi, la différence qui s'opère provient des conditions de connexion aux réservoirs qu'il convient de modifier. Pour les exposer, on utilisera l'exemple de la figure 3.7.

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction, pour comprendre exactement le transport dans la structure non locale de la figure 3.7, il faut à priori résoudre les équations à la fois pour le barreau et le matériau parcouru par le courant. Cette géométrie 2D n'est pas traitable avec la version actuelle du modèle collisionnel et pour comprendre la physique du barreau, nous allons modéliser l'effet du matériau parcouru par le courant par des conditions de bords effectives pour le barreau en  $x = 0$ . En effet, de manière effective, la couche parcourue par le courant agit comme un réservoir injectant des électrons dans un état hors-équilibre dans le barreau et une façon simple de modéliser cela consiste à généraliser les conditions de réservoirs utilisées en présence d'un courant de charge sous la forme :

$$n^+(0) = \alpha \frac{J_c}{v_f} \quad J_1^+(0) = \beta J_c \quad (3.58)$$

puisqu'en régime linéaire, l'état hors-équilibre est nécessairement proportionnel au courant de charge. Les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  sont caractéristiques de la statistique d'injection et mesure en particulier l'écart à l'équilibre thermodynamique. Dans notre cas, ces paramètres seront des constantes phénoménologiques qui ne peuvent être déterminées en toute rigueur qu'en résolvant exactement le problème de transport bidimensionnel.

Au niveau du bord externe en  $x = \Delta$ , des conditions relativement naturelles peuvent être dérivées en utilisant les conditions d'interface du modèle collisionnel dans lesquelles les grandeurs physiques correspondant à la couche de droite (extérieur du domaine) sont mises à zéro. Les conditions de réflexion-transmission pour les accumulations et les courants dégénèrent en une condition de réflexion totale unique :

$$n^+(\Delta) = n^-(\Delta) \Leftrightarrow J_1^+(\Delta) = -J_1^-(\Delta) \quad (3.59)$$

Le symbole équivalent signifie simplement qu'en l'absence de courant, ces deux équations traduisent la même information et l'on utilisera l'une ou l'autre de ces équations. La condition sur le champ électrique fournit alors :

$$E(\Delta) = 0 \quad (3.60)$$

qui est assez naturelle dans la mesure où aucun électron ne sort du barreau.

Pour résumer, les nouvelles conditions de bords à utiliser s'écrivent :

– Au point de connexion avec la couche parcourue par le courant (réservoir effectif) :

$$n^+(0) = \alpha \frac{J_c}{v_f} \quad J_1^+(0) = \beta J_c \quad (3.61)$$

– Au bord externe :

$$J_1^+(\Delta) = -J_1^-(\Delta) \quad E(\Delta) = 0 \quad (3.62)$$

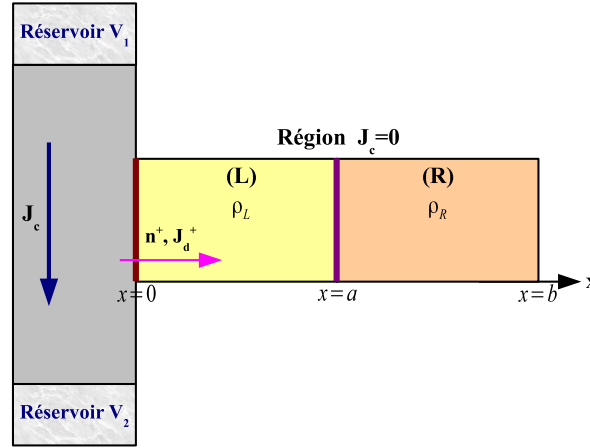


FIGURE 3.8 – Géométrie non locale bicouche. Un barreau constitué de deux matériaux est connecté perpendiculairement à une région traversée par un courant de charge  $J_c$ .

et permettent de générer un état hors-équilibre dans le barreau variant linéairement avec la densité de courant  $J_c$  circulant dans l'autre matériau.

Remarque : dans la suite, on utilisera les notations

$$q_1 = \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12 - \eta^2)} \quad (3.63)$$

$$q_2 = \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12 - \eta^2)} \quad (3.64)$$

### 3.3.3 Résistance non locale

Pour étudier le transport non local, nous présentons deux cas simples. Le premier, correspondant au cas du barreau monocouche de la figure 3.7, permettra de mettre en évidence le rôle du libre parcours moyen pour ce type de transport particulier. Le second cas porte sur un barreau bicouche (figure 3.8) et permet d'observer l'effet des paramètres d'interface.

#### Etude du cas monocouche

Pour caractériser le transport non locale, on introduit la résistance adimensionnée :

$$R = \frac{V(\Delta) - V(0)}{R_{sh}I} \quad (3.65)$$

qui représente le rapport entre la différence de potentiel apparaissant aux bornes du barreau ( $V(\Delta) - V(0)$ ) et le courant circulant dans le réservoir effectif I. Cette résistance est adimensionnée par la résistance de Sharvin  $R_{sh}$ .

L'apparition de cette tension peut se comprendre de la façon suivante : le matériau parcouru par le courant injecte des électrons hors-équilibre dans le barreau perturbant ainsi la densité électronique. L'accumulation produite engendre alors un potentiel électrique au sein du barreau par l'intermédiaire de l'équation de Poisson. On montre alors que la résistance 3.65 s'écrit sous la forme :

$$R = x_1\alpha + x_2\beta \quad (3.66)$$

avec

$$x_1 = \frac{\left(1 - e^{-\frac{\Delta}{\lambda_{TF}}}\right)^2}{\left(1 + e^{-\frac{2\Delta}{\lambda_{TF}}}\right)} \quad (3.67)$$

et

$$x_2 = \frac{\frac{3\sqrt{12}\eta^2}{(\eta^2-12)} \left(1 - e^{-\frac{\Delta\sqrt{12}}{\ell}}\right)^2}{\left[(3 + \sqrt{12}) - (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{2\Delta\sqrt{12}}{\ell}}\right]} + \frac{\left(1 - e^{-\frac{\Delta}{\lambda_{TF}}}\right)^2}{\left(1 + e^{-\frac{2\Delta}{\lambda_{TF}}}\right)} \frac{12\sqrt{12} (q_1 - q_2 e^{-\frac{2\Delta\sqrt{12}}{\ell}})}{\left[(3 + \sqrt{12}) - (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{2\Delta\sqrt{12}}{\ell}}\right]} \quad (3.68)$$

On constate que cette résistance est proportionnelle aux paramètres d'injection  $\alpha$  et  $\beta$ . En particulier, la contribution en  $\alpha$  est représentative du régime balistique ( $\ell = \infty$ ) et celle en  $\beta$  est caractéristique du régime diffusif ( $\ell \neq \infty$ ). On remarque qu'elle ne fait pas intervenir de dépendance linéaire en épaisseur (comme dans les résistances locales) et présente une variation exponentielle avec l'épaisseur de la couche. On note que  $R$  vaut zéro pour une épaisseur nulle du barreau et tend vers une valeur finie lorsque l'épaisseur de la couche est supérieur au libre parcours moyen (voir la figure 3.9). Cette valeur asymptotique est alors donnée par l'expression :

$$R(\Delta = \infty) = \alpha + \frac{3(2 + \sqrt{12})}{(3 + \sqrt{12})}\beta \approx \alpha + 2.5\beta \quad (3.69)$$

qui ne dépend que de la statistique d'injection via les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$ . L'existence de cette résistance asymptotique est assez naturelle puisque si le potentiel (et toutes les grandeurs physiques) tend bien vers zéro lorsqu'on est infiniment loin du point de connexion avec le réservoir effectif, la différence de potentiel  $V(\Delta = \infty) - V(0)$  reste non nulle puisque  $V(0)$  ne l'est pas. En particulier, La résistance asymptotique permet de déterminer le potentiel de contact ( $V(0)$ ) au réservoir effectif.

Nous voyons donc qu'en transport non local, la résistance varie exponentiellement avec l'épaisseur de la couche et tend vers une valeur constante fortement dépendante de la statistique d'injection des électrons dans le barreau.

### Etude du cas bicouche

Pour observer le rôle d'une interface sur la résistance non locale 3.65, on regarde à présent le cas d'un barreau bicouche (figure 3.8). La résistance non locale est alors définie par la relation :

$$R = \frac{V_R(b) - V_L(0)}{R_{sh}I} \quad (3.70)$$



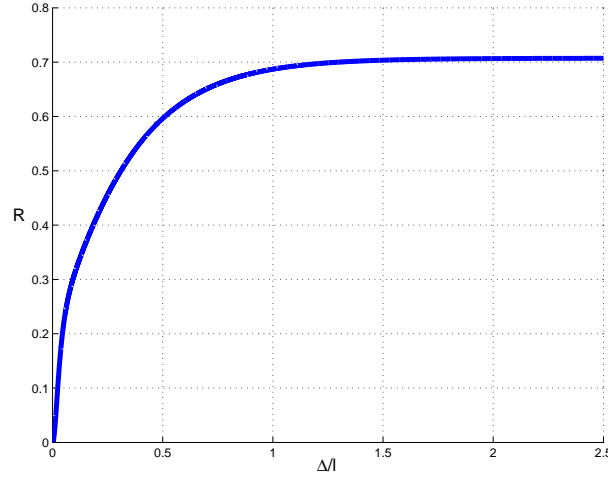


FIGURE 3.9 – Evolution de la résistance  $R$  (3.65) en fonction de l'épaisseur. Elle suit une loi d'évolution exponentielle dont la croissance est commandée par le libre parcours moyen. Elle tend vers une valeur constante ne dépendant que des paramètres d'injection  $\alpha$  et  $\beta$ . On constate que la valeur du plateau est atteinte lorsque  $\Delta \approx \ell$ . Pour cette figure, on a posé  $\alpha = \beta = 0.2$ .

qui est toujours associée à la différence de potentiel aux bornes du barreau. La figure 3.10 présente son évolution en fonction de l'épaisseur de la couche à droite de l'interface (figure 3.8) et pour différentes valeurs des coefficients de transmissions. On constate que cette résistance évolue toujours exponentiellement avec l'épaisseur de la couche et tend vers une valeur constante pour des épaisseurs grandes devant le libre parcours moyen. Cette valeur asymptotique dépend des coefficients de transmission  $T$  et  $t$  dont une expression approchée est donnée par la relation :

$$R(\Delta_R = \infty) \approx \alpha + x_3\beta \quad (3.71)$$

avec

$$x_3 = \frac{6 \left(1 - r e^{-\frac{2\Delta_L \sqrt{12}}{\ell_L}}\right) + 3\sqrt{12} \left(1 - r e^{-\frac{\Delta_L \sqrt{12}}{\ell_L}}\right) \left(1 - e^{-\frac{2\Delta_L \sqrt{12}}{\ell_L}}\right) + 3t \left(\sqrt{12} + \frac{4R}{T}\right) e^{-\frac{\Delta_L \sqrt{12}}{\ell_L}}}{\left[ (3 + \sqrt{12}) - r (3 - \sqrt{12}) e^{-\frac{2\Delta_L \sqrt{12}}{\ell_L}} \right]} \quad (3.72)$$

Cette relation à la même structure que celle de la monocouche (expression 3.69) dans laquelle le facteur numérique dépend maintenant de l'épaisseur de la première couche du barreau et des coefficients d'interface  $T$  et  $t$ . A travers cette expression, on constate que les effets d'interfaces sont d'autant plus important que l'épaisseur de la première couche ( $\Delta_L$ ) est petite et on comprend la différence de comportement entre les courbes 3.10 (a) et 3.10 (b) puisque la dépendance en transmission isotrope étant en  $T^{-1}$ , la valeur asymptotique augmente donc lorsque  $T$  diminue alors qu'elle augmente avec la transmission anisotrope puisque la valeur asymptotique est quasi proportionnelle à celle-ci.

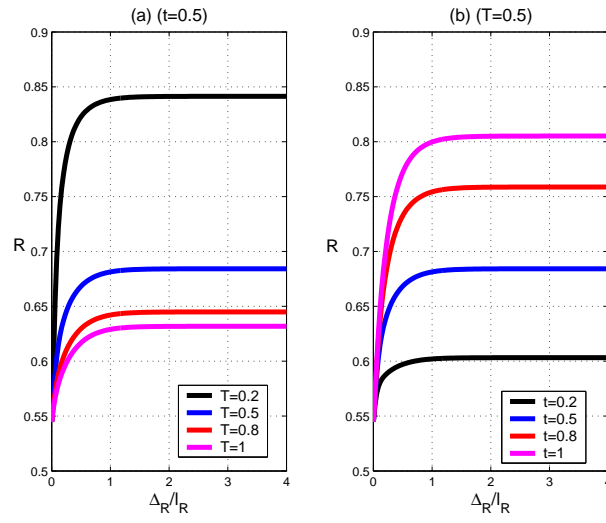


FIGURE 3.10 – Evolution de la résistance non locale du bicouche en fonction de l'épaisseur de la couche de droite. l'épaisseur de la couche à gauche de l'interface est fixée à  $\Delta_L = 2.5\text{nm}$  et les libres parcours moyen sont définies à partir de la valeur  $\ell_m = 5\text{nm}$  et du facteur d'asymétrie  $\alpha = 0.3$ ,  $\ell_L = \ell_m (1 + \alpha) = 6.5\text{nm}$ ,  $\ell_R = \ell_m (1 - \alpha) = 3.5\text{nm}$ . La figure (a) présente cette évolution pour différentes transmissions balistiques  $T$  ( $t$  est fixée à 0.5) et la figure (b) montre cette même évolution pour différentes transmissions diffuses  $t$  ( $T$  étant fixée à 0.5).

A travers ces exemples simples, nous voyons que pour le transport non local le libre parcours moyen est crucial. Ceci nous montre en particulier que les effets prédits sont caractéristiques du modèle collisionnel. En effet, le modèle dérive-diffusion ne faisant apparaître que la longueur d'écran comme longueur de décroissance, l'évolution exponentielle avec le libre parcours moyen ne peut donc être reproduite avec ce modèle. D'autre part, en observant l'expression asymptotique de la résistance non locale du bicouche, on constate que celle-ci ne dépend de la transmission isotrope qu'à travers l'existence de la transmission anisotrope puisque si cette dernière est nulle, elle fait également disparaître la transmission isotrope  $T$ . Or, pour le modèle dérive-diffusion, la transmission anisotrope est complètement absente puisque la contribution anisotrope du courant est mal définie. En particulier, l'absence de courant de charge montre que les quantités chirales associées au modèle dérive-diffusion s'écrivent :

$$n^\pm(x) = \frac{n(x)}{2} \quad J_1^\pm = 0 \quad (3.73)$$

montrant que la composante anisotrope du courant, indispensable pour introduire le coefficient de transmission  $t$ , est nulle. De plus, en transport non locale, l'absence de courant de charge montre que les paramètres d'interfaces seraient sans effets sur la résistance non locale puisque la condition de saut d'accumulation (relation 2.195) devient une condition de continuité :

$$v_{fR}n_R - v_{fL}n_L = -\frac{4R}{T}J_c \Rightarrow v_{fR}n_R = v_{fL}n_L \quad (3.74)$$

puisque  $J_c = 0$ . Cette conséquence est cohérente avec la nécessité une transmission anisotrope (qui n'existe pas pour dérive-diffusion) pour observer un effet des paramètres d'interface. Nous comprenons ainsi que ces effets non locaux sont bien typiques du modèle collisionnel et ceux d'autant plus qu'on a pu noter que la résistance non locale dépend fortement de la statistique d'injection qui n'est bien définie qu'en adoptant une représentation chirale du transport.

### 3.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté quelques conséquences du modèle collisionnel dans le cadre du transport de charge. Nous avons montré qu'il est possible d'établir une représentation de ce modèle macroscopique en terme de potentiel électrochimique moyennant une hypothèse très raisonnable pour les métaux. Nous avons ensuite essayé de mettre en évidence des effets de libre parcours moyen dans le cadre du transport local et non local. Pour le transport local, nous avons établi l'expression générale de la résistance deux terminaux. Celle-ci varie continûment de sa valeur balistique à celle diffusive lorsqu'on fait varier le libre parcours moyen et présente certains extremums en fonction des paramètres d'interface au voisinage de la transition balistique-diffusif. Concernant le transport non local, nous avons présenté des calculs de principes visant à montrer que les effets prédits sont d'une part caractéristiques du libre parcours moyen et d'autre part associés au modèle collisionnel. En particulier, grâce aux chiralités, nous avons fourni une modélisation simple des effets non locaux par l'intermédiaire de conditions de réservoir effectives.

## Chapitre 4

# Transport dans les vanes de spin colinéaires

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>82</b>
<b>4.2</b>	<b>Polarisation en spin du modèle collisionnel</b>	<b>86</b>
<b>4.3</b>	<b>Conclusion</b>	<b>95</b>

---

Ce chapitre est consacré à l'extension du modèle collisionnel au cas de structures contenant des matériaux magnétiques. La dérivation du modèle collisionnel pour ce type de système étant très similaire, ce chapitre a été épuré au maximum afin d'éviter les redondances avec les chapitres précédents et certains détails sont présentés dans l'annexe C. Ce chapitre est décomposé comme suit : nous commençons par introduire le concept de vanne de spin colinéaire ainsi que le modèle de transport de base pour étudier ce type de structure, le modèle Valet-Fert [60]. Nous passons ensuite à l'extension du modèle collisionnel en fournissant la généralisant des équations de transport et des conditions de bords et d'interfaces en présence de spin. Ce chapitre sera essentiellement consacré à la présentation du modèle pour la raison que cette extension en spin fait encore l'objet d'études sur lesquelles nous reviendrons dans la conclusion.

## 4.1 Introduction

### 4.1.1 Les vanes de spin

Une vanne de spin correspond à l'empilement de matériaux magnétiques et non magnétiques ayant des propriétés de volume différentes (vitesse de Fermi, libre parcours moyen,...). Dans ces systèmes, la présence de champ d'aimantation influence les propriétés de transport qui varient en fonction du changement d'alignement des différents champs d'aimantation. Ce phénomène, connu sous le nom de magnétorésistance, s'explique par une polarisation en spin des propriétés de transport ([116], [117]). Les électrons ne se propagent pas de la même manière au sein de la structure en fonction de leur état de spin provoquant ainsi une séparation du courant en deux contributions, une par état de spin.

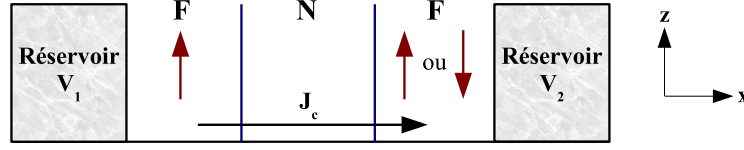


FIGURE 4.1 – Exemple simple de vanne de spin colinéaire CPP. Celle-ci est constituée de deux matériaux ferromagnétiques (F) connectés à des réservoirs et séparés par un métal non magnétique (N). Le champs d'aimantation de chaque ferromagnétique est uniforme et orienté dans la même direction qui sera choisie comme l'axe  $z$ .

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au cas des vannes de spin colinéaires qui se caractérisent par la présence de champs d'aimantation uniformes dirigés dans la même direction qui sera pour nous l'axe  $z$ . La figure 4.1 en fournit un exemple. Lorsque les champs d'aimantation sont orientés dans le même sens, on parle alors du cas parallèle (P) et dans le cas contraire du cas anti-parallèle (AP).

Pour décrire le transport dans ces systèmes, il faut donc détailler la description en séparant les électrons suivant leur état de spin "up" ou "down". Le transport est de nouveau étudié à partir de l'équation de Boltzmann décrivant maintenant l'évolution d'une fonction de distribution polarisée en spin  $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  où l'indice  $s = \uparrow, \downarrow$  désigne l'état de spin. Ainsi, en présence de cette polarisation en spin, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_s + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_s = \frac{1}{\tau_s} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_s(\Omega') - f_s(\Omega)) + \frac{1}{\tau_{sf}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_{-s}(\Omega') - f_s(\Omega)) \quad (4.1)$$

où  $\tau_s$  caractérise les collisions sans retournement de spin et  $\tau_{sf}$  décrit les processus de retournement de spin. Pour la géométrie qui nous intéresse, la fonction de distribution ne dépend que la variable d'espace  $x$  et évolue toujours sous l'action d'un champ électrique autocohérent dirigé suivant  $x$  :

$$\mathbf{F} = -eE(x)\mathbf{e}_x = e\partial_x V \mathbf{e}_x \quad (4.2)$$

où  $V$  est le potentiel électrique. On supposera toujours un état stationnaire. Ainsi, l'équation 4.1 prend la forme :

$$v_x \frac{\partial f_s}{\partial x} + ev_x \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial \epsilon} = \frac{1}{\tau_s} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_s(\Omega') - f_s(\Omega)) + \frac{1}{\tau_{sf}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_{-s}(\Omega') - f_s(\Omega)) \quad (4.3)$$

où l'on a introduit l'énergie  $\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$ . A partir des fonctions de distribution  $f_s$ , on peut calculer une densité de charge  $n_s$  et un courant de charge  $J_s$  polarisées en spin :

$$n_s(x) = -e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} f_s(x, \mathbf{v}) \quad (4.4)$$

$$J_s(x) = -e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} v_x f_s(x, \mathbf{v}) \quad (4.5)$$

Le potentiel électrique  $V$  autocohérent vérifie alors l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{(n_{\uparrow}(x) + n_{\downarrow}(x) - n_{eq})}{\epsilon} \quad (4.6)$$

où  $n_{eq}$  est la densité de charge d'équilibre. Notons enfin que l'état d'équilibre est supposé non magnétique et caractérisé par la fonction de distribution de Fermi-Dirac à température nulle quelque soit l'état de spin :

$$f_s^{eq} = \theta(\epsilon_f - \epsilon) \quad (4.7)$$

Cette hypothèse consiste à supposer que le champ d'échange du gaz d'électrons polarisé est faible. Les densités d'électrons d'équilibre sont donc simplement fournies par la relation :

$$n_{0\uparrow} = n_{0\downarrow} = \frac{n_0}{2} \quad n_0 = \frac{8\pi m^3 v_f^3}{3h^3} \quad (4.8)$$

où  $n_0$  est la densité d'électrons d'équilibre et  $v_f$  la vitesse de Fermi.

Ainsi, les équations 4.3 à 4.7 constituent la base de tous les développements de ce chapitre.

Avant de poursuivre, nous introduisons quelques notations. A partir des temps de relaxation  $\tau_s$  et  $\tau_{sf}$  intervenant dans l'équation de Boltzmann, on définit les deux libres parcours moyen :

$$\ell_s = v_f \tau_s \quad \ell_{sf} = v_f \tau_{sf} \quad (4.9)$$

où  $v_f$  est la vitesse de Fermi. On introduit ensuite la longueur effective  $\lambda_s$  définie par :

$$\frac{1}{\lambda_s} = \frac{1}{\ell_s} + \frac{1}{\ell_{sf}} \quad (4.10)$$

et la conductivité de Drude,  $\sigma_{ds}$ , polarisée en spin :

$$\sigma_{ds} = \frac{e^2 n_{0s} \lambda_s}{m v_f} = \frac{e^2 n_0 \lambda_s}{2m v_f} \quad (4.11)$$

compte tenue des hypothèses de travail. La conductivité de Drude du matériau est alors la somme des conductivités de Drude pour chaque état de spin s :

$$\sigma_d = \sigma_{d\uparrow} + \sigma_{d\downarrow} = \frac{e^2 n_0 (\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})}{2m v_f} \quad (4.12)$$

On posera également  $\rho_d = \frac{1}{\sigma_d}$ , la résistivité de Drude du matériau. Enfin, la constante de diffusion  $D_s$  polarisée en spin est définie par :

$$D_s = \frac{v_f \lambda_s}{3} \quad (4.13)$$

Toutes ces notations sont une simple extension en spin de celles correspondant au transport de charge.

### 4.1.2 Le modèle Valet-Fert

A partir de l'équation de Boltzmann 4.3, l'équivalent du modèle dérive-diffusion pour les vannes de spin colinéaires a été dérivé. Ce modèle, dit de Valet-Fert ([60]), constitue le modèle de base pour l'étude du transport dans les vannes colinéaires et a fait l'objet de plusieurs études et extensions ([61] à [73] ou encore [105]).

Ce modèle, que nous résumons ici, s'obtient de l'équation de Boltzmann 4.3 en linéarisant la fonction de distribution autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique et en décomposant la composante hors-équilibre de la fonction de distribution sur les polynômes de Legendre ordinaire (procédure complètement similaire à la dérivation du modèle dérive-diffusion). En tronquant les équations à l'ordre un dans les polynômes de Legendre, T. Valet et A. Fert ([60]) ont dérivé un modèle de transport macroscopique portant sur le potentiel électrochimique,  $\mu_s$ , polarisé en spin définie par :

$$\mu_s(x) = V(x) + \frac{D_s}{\sigma_{ds}} n_s(x) \quad (4.14)$$

où  $V$  est le potentiel électrique,  $n_s$  l'accumulation de charge pour l'état de spin  $s$ ,  $\sigma_{ds}$  et  $D_s$  sont définies par 4.11 et 4.13. Ces potentiels vérifient alors les équations de transport :

$$\frac{1}{\sigma_{ds}} \frac{\partial J_s}{\partial x} = \frac{\mu_{-s}(x) - \mu_s(x)}{D_s \tau_{sf}} \quad (4.15)$$

$$J_s(x) = -\sigma_{ds} \frac{\partial \mu_s}{\partial x} \quad (4.16)$$

où  $s = \uparrow, \downarrow$  désigne l'état de spin et  $J_s$  le courant de charge par état de spin. Les solutions de ces équations s'écrivent sous la forme d'exponentielle faisant intervenir une longueur de décroissance, la longueur de diffusion de spin  $\ell_{sd}$  :

$$\frac{1}{\ell_{sd}^2} = \frac{3}{\ell_{sf}} \left( \frac{1}{\lambda_{\uparrow}} + \frac{1}{\lambda_{\downarrow}} \right) \quad (4.17)$$

Le point important dans ces équations est que bien qu'il y ait du spin-flip, les courants pour chaque état de spin restent découplés puisqu'ils ne sont liés qu'au gradient du potentiel électrochimique de même spin. En particulier, les profils de potentiels électrochimiques  $\mu_s$  et de courant  $J_s$  prennent la forme :

$$\mu_s(x) = \rho_d J_c \left[ C - x + (-1)^s \frac{\lambda_{-s}}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} \left( A e^{\frac{x}{\ell_{sd}}} + B e^{-\frac{x}{\ell_{sd}}} \right) \right] \quad (4.18)$$

$$J_s(x) = \frac{J_c \lambda_s}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} \left[ 1 - (-1)^s \frac{\lambda_{-s}}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}) \ell_{sd}} \left( A e^{\frac{x}{\ell_{sd}}} - B e^{-\frac{x}{\ell_{sd}}} \right) \right] \quad (4.19)$$

où  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont des constantes d'intégration déterminées par les conditions d'interface et  $J_c = J_{\uparrow} + J_{\downarrow}$  est la densité uniforme de courant de charge.

A ces équations de volume sont associées les relations de raccord aux interfaces :

$$J_{sL} = J_{sR} \quad (4.20)$$

$$\bar{\mu}_{sR} - \bar{\mu}_{sL} = r_s J_s \quad (4.21)$$

où R (right) et L (left) désignent respectivement les matériaux à droite et à gauche de l'interface. Ces conditions traduisent la continuité des courants par état de spin ainsi qu'un saut de potentiel électrochimique lié à la résistance  $r_s$  caractéristique de l'interface ([60]). Ces conditions supposent une absence de spin-flip à l'interface et la généralisation en présence de spin-flip d'interface est fournie dans [62] par l'introduction d'une résistance de spin-flip d'interface. Ce modèle a été utilisé à de multiples reprises ([110] et [118] à [144]) et a permis de comprendre avec succès les effets de magnétorésistance géante.

Notons pour terminer que la compréhension précise de la résistance d'interface a fait l'objet de plusieurs travaux (semi-classiques [81] à [86] et quantiques [87] à [89]) pour comprendre son lien avec la transmissibilité de l'interface. Le modèle collisionnel fournit alors un nouveau lien entre ces deux notions puisqu'il permet d'établir des expressions pour les résistances d'interface en fonction des coefficients de transmission et de réflexion et contenant les effets de spin-flip d'interface.

## 4.2 Polarisation en spin du modèle collisionnel

Dans cette section, nous allons fournir l'extension en spin du modèle collisionnel. Les développements étant très similaires à ceux effectués pour le transport de charge, la dérivation microscopique est présentée dans l'annexe C et nous présentons directement le modèle macroscopique et ses principales conséquences. Nous commençons par fournir les nouvelles équations de transport ainsi que les expressions des grandeurs macroscopiques. Ensuite, les conditions de connexion aux réservoirs et d'interface sont introduites. La quatrième partie est consacrée aux potentiels électrochimiques généralisés et nous terminerons par la limite dérive-diffusion.

### 4.2.1 Equations de transport

Les équations de transport pour les quantités macroscopiques s'obtiennent de l'équation de Boltzmann 4.3 en séparant les électrons se propageant vers la droite de ceux se dirigeant vers la gauche pour chaque état de spin. Pour résoudre les quatre équations de Boltzmann couplées, on linéarise alors chaque fonction de distribution chirale autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique. Les parties hors-équilibre des fonctions de distribution sont ensuite décomposées sur la base des polynômes de Legendre décalés. La troncature des équations à l'ordre un dans ces polynômes conduit alors aux équations de transport présentées ici. La partie C.1 de l'annexe C détail cet aspect.

Comme pour le transport de charge, il existe différentes formulations équivalentes des équations de transport et nous donnons les trois principales dans ce paragraphe.



**La représentation chirale en termes de courants anisotropes et densités chirales**

$$\frac{\partial n_s^\pm}{\partial x} + \frac{\epsilon}{4\lambda_{TF}^2} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{(n_s^- - n_s^+)}{\ell_s} \pm \frac{3}{2} \frac{[(n_{-s}^\pm - n_s^\pm) + (n_{-s}^\mp - n_s^\pm)]}{\ell_{sf}} + \frac{2}{D_s} J_{1s}^\pm \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial J_{1s}^\pm}{\partial x} \pm \frac{3}{\lambda_s} J_{1s}^\pm = \frac{n_s^\pm - n_s^\mp}{4\tau_s} + \frac{[(n_s^\pm - n_{-s}^\pm) + (n_s^\pm - n_{-s}^-)]}{4\tau_{sf}} \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{(n_\uparrow^+ + n_\uparrow^- + n_\downarrow^+ + n_\downarrow^-)}{\epsilon} \quad (4.24)$$

Dans ces équations,  $n_s^\pm$  et  $J_{1s}^\pm$  désignent les accumulations de charge et les composantes anisotropes du courant par état de spins et chiralités.  $V$  est le potentiel électrique. En particulier, chaque courant de spin chiraux est la somme d'une composante isotrope  $J_{0s}^\pm$  et anisotrope  $J_{1s}^\pm$  :

$$J_s^\pm = J_{0s}^\pm + J_{1s}^\pm \quad J_{0s}^\pm = \pm \frac{v_f}{2} n_s^\pm \quad (4.25)$$

et les courants de charge par état de spin ont donc la structure générale :

$$J_s = \frac{v_f}{2} (n_s^+ - n_s^-) + J_{1s}^+ + J_{1s}^- \quad (4.26)$$

Le courant de charge  $J_c$  est fourni par la somme des courants pour état de spin :

$$J_c = J_\uparrow + J_\downarrow \quad (4.27)$$

Cette première représentation permet en particulier d'établir facilement le lien entre le régime balistique et diffusif.

### La représentation non chirale

La représentation non chirale consiste à réécrire les équations précédentes en termes des grandeurs non chirales :

$$n_s(x) = n_s^+(x) + n_s^-(x) \quad \delta n_s(x) = n_s^+(x) - n_s^-(x) \quad (4.28)$$

$$J_s(x) = J_s^+(x) + J_s^-(x) \quad J_{ps} = J_s^+(x) - J_s^-(x) \quad (4.29)$$

Les équations de transport deviennent alors :

$$\frac{\partial J_s}{\partial x} = \frac{n_{-s} - n_s}{\tau_{sf}} \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial J_{ps}}{\partial x} + \frac{3\sigma_{ds}}{2\lambda_s} \frac{\partial V}{\partial x} = - \left( \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_{sf}} \right) \delta n_s \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{(n_\uparrow + n_\downarrow)}{\epsilon} \quad (4.32)$$

$$J_{ps} = \frac{v_f}{2} n_s + \frac{D_s}{2} \frac{\partial \delta n_s}{\partial x} + \frac{3D_s}{2\ell_{sf}} (n_s - n_{-s}) \quad (4.33)$$

$$J_s = v_f \delta n_s + \frac{D_s}{2} \frac{\partial n_s}{\partial x} + \frac{\sigma_{ds}}{2} \frac{\partial V}{\partial x} \quad (4.34)$$

Cette deuxième représentation est très utile pour comprendre le passage au modèle Valet-Fert.

### La représentation en terme de potentiels électrochimiques chiraux et courants anisotropes

Comme pour le transport de charge, les équations s'écrivent assez naturellement en termes de potentiels électrochimiques chiraux qui sont définis par une simple polarisation en spin de la relation du transport de charge :

$$\mu_s^\pm(x) = n_s^\pm(x) + \frac{\epsilon}{4\lambda_{TF}^2} V(x) \quad (4.35)$$

Les équations de transport prennent alors la forme :

$$\frac{\partial \mu_s^\pm}{\partial x} = \frac{3}{2} \frac{(\mu_s^- - \mu_s^+)}{\ell_s} \pm \frac{3}{2} \frac{(\mu_{-s}^+ - \mu_s^\pm) + (\mu_{-s}^- - \mu_s^\pm)}{\ell_{sf}} + \frac{4}{\sigma_{ds}} J_{1s}^\pm \quad (4.36)$$

$$\frac{1}{\sigma_{ds}} \left( \frac{\partial J_{1s}^\pm}{\partial x} \pm \frac{3}{\lambda_s} J_{1s}^\pm \right) = \frac{\mu_s^\pm - \mu_s^\mp}{8D_s\tau_s} + \frac{[(\mu_s^\pm - \mu_{-s}^+) + (\mu_s^\pm - \mu_{-s}^-)]}{8D_s\tau_{sf}} \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda_{TF}^2} V = -\frac{1}{\lambda_{TF}^2} \frac{(\mu_\uparrow^+ + \mu_\uparrow^- + \mu_\downarrow^+ + \mu_\downarrow^-)}{4} \quad (4.38)$$

Cette troisième représentation est particulièrement utile pour déterminer les expressions des grandeurs macroscopiques et le traitement du transport dans les métaux.

#### 4.2.2 Profils des grandeurs macroscopiques

Pour résoudre les équations de transport, il est judicieux d'utiliser la représentation en termes de potentiels chiraux et d'introduire les quantités

$$\Delta\mu = \frac{\sigma_{ds}}{2D_s} [(\mu_s^+ + \mu_s^-) - (\mu_{-s}^+ + \mu_{-s}^-)] \quad F_s = \frac{J_{ds}^+ - J_{ds}^-}{v_f} \quad (4.39)$$

qui vérifient le système d'équations différentielles :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \begin{pmatrix} \Delta\mu \\ F_s \\ F_{-s} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{12}{\ell_{sf}} \left( \frac{1}{\lambda_s} + \frac{1}{\lambda_{-s}} \right) & -\frac{36}{\lambda_s^2} & \frac{36}{\lambda_{-s}^2} \\ -\frac{3}{\ell_{sf}\lambda_s} & \frac{12}{\lambda_s^2} & 0 \\ \frac{3}{\ell_{sf}\lambda_{-s}} & 0 & \frac{12}{\lambda_{-s}^2} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mu \\ F_s \\ F_{-s} \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Les solutions s'écrivent alors sous la forme de combinaison linéaire d'exponentielles faisant intervenir trois longueurs de décroissance qu'on notera génériquement  $\ell_i$  ( $i = 1, 2$  ou  $3$ ) et qui correspondent aux valeurs propres de la matrice du système ci-dessus. Il n'est pas simple d'établir l'expression exacte de ces trois longueurs caractéristiques puisqu'elles vérifient une équation algébrique d'ordre trois. On se contente de donner leurs expressions pour quelques cas limites :

-  $l_{sf} = +\infty$  :

$$\frac{1}{\ell_1^2} = \frac{12}{\ell_{\uparrow}^2} \quad \frac{1}{\ell_2^2} = \frac{12}{\ell_{\downarrow}^2} \quad \frac{1}{\ell_3^2} = 0 \quad (4.41)$$

-  $l_{\uparrow} = l_{\downarrow} = +\infty, l_{sf} \neq +\infty$  :

$$\frac{1}{\ell_1^2} = \frac{12}{\ell_{sf}^2} \quad \frac{1}{\ell_2^2} = \frac{(3 + \sqrt{7})}{\ell_{sf}^2} \quad \frac{1}{\ell_3^2} = \frac{(3 - \sqrt{7})}{\ell_{sf}^2} \quad (4.42)$$

-  $l_{\uparrow} = l_{\downarrow} = \ell, l_{sf} \neq +\infty$  :

$$\frac{1}{\ell_1^2} = \frac{12}{\lambda^2} \quad \frac{1}{\ell_2^2} = \frac{6}{\lambda} \left( \frac{2}{\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda} + \sqrt{\frac{4}{\ell_{sf}^2} + \frac{2}{\lambda \ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda^2}} \right) \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{\ell_3^2} = \frac{6}{\lambda} \left( \frac{2}{\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda} - \sqrt{\frac{4}{\ell_{sf}^2} + \frac{2}{\lambda \ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda^2}} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\ell} + \frac{1}{\ell_{sf}} \quad (4.44)$$

On remarque que la présence de la longueur de spin flip engendre toujours trois longueurs de décroissance.

La partie C.2.1 de l'annexe C fournit des détails concernant la résolution de ces équations et nous donnons simplement les profils des grandeurs macroscopiques fondamentales pour éviter une liste trop important d'expressions mathématiques.

- **Les accumulations chirales** : les accumulations de charge par spin et chiralité s'écrivent :

$$n_s^{\pm}(x) = \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \pm \frac{\lambda_s}{2(\lambda_s + \lambda_{-s})} + \sum_{i=1}^3 \left( q_{1i}(\lambda_s) a_i e^{\pm \frac{x}{\ell_i}} + q_{2i}(\lambda_s) b_i e^{\mp \frac{x}{\ell_i}} \right) - \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (4.45)$$

Dans ces expressions, on a introduit les quantités :

$$q_{1i}(x) = \frac{6\ell_i^2 (x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} - \frac{3\ell_i (x^2 - 6\ell_i^2)}{2\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} + \frac{1}{4 \left(1 - \frac{\lambda_{TF}^2}{\ell_i^2}\right)} \left(1 - \frac{24\ell_i^2 (x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)}\right) \quad (4.46)$$

$$q_{2i}(x) = \frac{6\ell_i^2 (x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} + \frac{3\ell_i (x^2 - 6\ell_i^2)}{2\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} + \frac{1}{4 \left(1 - \frac{\lambda_{TF}^2}{\ell_i^2}\right)} \left(1 - \frac{24\ell_i^2 (x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)}\right) \quad (4.47)$$

qui vérifient la règle de somme :

$$q_{1i}(\lambda_{\uparrow}) + q_{2i}(\lambda_{\uparrow}) + q_{1i}(\lambda_{\downarrow}) + q_{2i}(\lambda_{\downarrow}) = 1 \quad (4.48)$$

- **Les courants diffusifs chiraux** :

$$J_{ds}^{\pm}(x) = \frac{J_c}{8} \left[ \frac{\lambda_s}{(\lambda_s + \lambda_{-s})} + s \sum_{i=1}^3 \left( \Gamma_{1i}(\lambda_s) a_i e^{\pm \frac{x}{\ell_i}} - \Gamma_{2i}(\lambda_s) b_i e^{\mp \frac{x}{\ell_i}} \right) \right] \quad (4.49)$$

où l'on a introduit les notations :

$$\Gamma_{1i}(x) = \frac{3\ell_i (x^2 + 6\ell_i (\ell_i - x))}{\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} \quad \Gamma_{2i}(x) = \frac{3\ell_i (x^2 + 6\ell_i (\ell_i + x))}{\ell_{sf} (x^2 - 12\ell_i^2)} \quad (4.50)$$

– **Le potentiel électrique** : celui-ci s'écrit sous la forme :

$$V(x) = \frac{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}) J_c}{(\sigma_{d\uparrow} + \sigma_{d\downarrow})} \left[ \frac{d}{4} - \frac{x}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})} + \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \sum_{i=1}^3 \omega_i \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \right] \quad (4.51)$$

où le coefficient  $\omega_i$  s'écrit :

$$\omega_i = \frac{1}{2} (q_{1i}(\lambda_{\uparrow}) + q_{2i}(\lambda_{\uparrow})) - \frac{6\ell_i^2 (\lambda_{\uparrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\uparrow} \ell_{sf} (\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} = \frac{6\ell_i^2 (\lambda_{\downarrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\downarrow} \ell_{sf} (\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} - \frac{1}{2} (q_{1i}(\lambda_{\downarrow}) + q_{2i}(\lambda_{\downarrow})) \quad (4.52)$$

Avec ces grandeurs moyennes, on peut alors déterminer toutes les grandeurs macroscopiques d'intérêt. Notons que les expressions présentées ici correspondent aux cas où les libres parcours moyen  $\ell_{\uparrow}$  et  $\ell_{\downarrow}$  sont différents. Lorsqu'ils sont égaux, comme c'est le cas pour les métaux normaux, les solutions changent de structure et les expressions des grandeurs macroscopiques doivent être modifiées. Les quantités macroscopiques correspondant au cas  $\ell_{\uparrow} = \ell_{\downarrow}$  sont présentées en annexe C.3. Il faut noter que ce fait provient essentiellement de la forme des solutions que nous avons adopté ici car ne connaissant pas l'expression exacte des longueurs propres  $\ell_i$ , il est difficile de prendre la limite  $\ell_{\uparrow} = \ell_{\downarrow}$  dans ces équations puisque dans ce cas, une des longueurs propres annule le dénominateur  $\lambda_{\uparrow, \downarrow}^2 - 12\ell_i^2$ .

### 4.2.3 Conditions de bords et d'interface

#### Equations de bords et d'interface générales

Les profils des grandeurs macroscopiques étant connus, il reste à déterminer les différentes constantes d'intégration  $\lambda_i$  et  $\beta_i$ . Pour ce faire, il faut spécifier les conditions de raccord aux interfaces et de connexion aux réservoirs.

En adoptant une description des effets d'interface en termes d'intégrales de collision polarisées en spin (voir la partie C.4 de l'annexe C), on peut établir un jeu de conditions pour les grandeurs macroscopiques généralisant celui introduit pour le transport pur de charge. Les équations de raccords aux interfaces à appliquer en présence d'une polarisation en spin s'écrivent donc sous la forme :

– **La conservation des particules entrantes et sortantes :**

$$n_{Rs}^+ = R_s n_{Rs}^- + R_{sf} n_{R-s}^- + T_s n_{Ls}^+ + T_{sf} n_{L-s}^+ \quad (4.53)$$

$$n_{Ls}^- = R_s n_{Ls}^+ + R_{sf} n_{L-s}^+ + T_s n_{Rs}^- + T_{sf} n_{R-s}^- \quad (4.54)$$

– **La conservation du courant :**

$$\begin{aligned} J_{Rs}^+ &= T_s J_{0Ls}^+ + t_s J_{1Ls}^+ + T_{sf} J_{0L-s}^+ + t_{sf} J_{1L-s}^+ \\ &- R_s J_{0Rs}^- - r_s J_{1Rs}^- - R_{sf} J_{0R-s}^- - r_{sf} J_{1R-s}^- \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} J_{Ls}^- &= -R_s J_{0Ls}^+ - r_s J_{1Ls}^+ - R_{sf} J_{0L-s}^+ - r_{sf} J_{1L-s}^+ \\ &+ T_s J_{0Rs}^- + t_s J_{1Rs}^- + T_{sf} J_{0R-s}^- + t_{sf} J_{1R-s}^- \end{aligned} \quad (4.56)$$

– **La continuité du champ électrique :**

$$E_R = E_L \quad (4.57)$$

– **La continuité du potentiel électrique :**

$$V_R = V_L \quad (4.58)$$

où L et R désignent respectivement la gauche et la droite de l'interface. Les coefficients de transmission balistiques ( $R_s, T_s, T_{sf}$  et  $R_{sf}$ ) et diffusifs ( $r_s, t_s, t_{sf}$  et  $r_{sf}$ ) vérifient les règles de somme :

$$R_s + T_s + R_{sf} + T_{sf} = 1 \quad (4.59)$$

$$r_s + t_s + r_{sf} + t_{sf} = 1 \quad (4.60)$$

Notons que les équations portant sur les accumulations sont toujours compatibles avec la continuité de la quantité  $\delta n = n^+ - n^-$  :

$$\delta n_{R\uparrow} + \delta n_{R\downarrow} = \delta n_{L\uparrow} + \delta n_{L\downarrow} \quad (4.61)$$

et celles sur les courants assurent la continuité du courant de charge  $J_c$ .

D'autre part, à partir des équations sur les accumulations, on peut montrer que le saut d'accumulation par état de spin à l'interface est donné par la relation :

$$n_{Rs} - n_{Ls} = -\Sigma_s (\delta n_{Rs} + \delta n_{Ls}) - \Sigma_{sf} (\delta n_{R-s} + \delta n_{L-s}) \quad (4.62)$$

où l'on a introduit :

$$\Sigma_s = \frac{(2T_{-s} + T_{sf} + R_{sf})(2R_s + T_{sf} + R_{sf}) + (T_{sf} - R_{sf})^2}{(2T_{\uparrow} + T_{sf} + R_{sf})(2T_{\downarrow} + T_{sf} + R_{sf}) - (T_{sf} - R_{sf})^2} \quad (4.63)$$

et

$$\Sigma_{sf} = \frac{2(R_{sf} - T_{sf})}{(2T_{\uparrow} + T_{sf} + R_{sf})(2T_{\downarrow} + T_{sf} + R_{sf}) - (T_{sf} - R_{sf})^2} \quad (4.64)$$

Les équations sur les courants permettent d'écrire une relation fournissant la répartition du courant à l'interface en fonction des différents flux incidents :

$$J_c = (T_\uparrow + T_{sf}) \left( J_{0L\uparrow}^+ + J_{0R\uparrow}^- \right) + (t_\uparrow + t_{sf}) \left( J_{1L\uparrow}^+ + J_{1R\uparrow}^- \right) \\ + (T_\downarrow + T_{sf}) \left( J_{0L\downarrow}^+ + J_{0R\downarrow}^- \right) + (t_\downarrow + t_{sf}) \left( J_{1L\downarrow}^+ + J_{1R\downarrow}^- \right) \quad (4.65)$$

qui traduit la répartition du courant de charge aux interfaces en fonction des différents types de courants incidents.

Concernant la connexion aux réservoirs, les équations généralisent simplement celles correspondantes à un transport purement de charge :

– **Le réservoir de gauche :**

$$n_s^+ = 0 \quad J_{1s}^+ = 0 \quad (4.66)$$

– **Le réservoir de droite :**

$$n_s^- = 0 \quad J_{1s}^- = 0 \quad (4.67)$$

Ces relations expriment simplement que les électrons injectés aux bords du multicouche proviennent de source à l'équilibre thermodynamique aussi bien pour la charge que pour le spin.

Avec ces conditions de raccords aux interfaces et aux réservoirs, on peut alors résoudre un multicouche quelconque. Notons pour terminer qu'on peut développer une approche du type matrice de transfert pour les équations d'interfaces. Celle-ci est présentée dans le paragraphe C.5 de l'annexe C.

#### 4.2.4 Expressions des conditions de bords et d'interface en termes de potentiel électrochimique

Comme dans le cadre du transport de charge, on peut écrire des équations d'interface en termes de potentiels électrochimiques chiraux en supposant que la densité d'état à l'énergie de Fermi varie peu d'un métal à l'autre. On obtient ainsi des équations de passage à l'interface qui prennent la forme :

$$\mu_{Rs}^+ = R_s \mu_{Rs}^- + R_{sf} \mu_{R-s}^- + T_s \mu_{Ls}^+ + T_{sf} \mu_{L-s}^+ \quad (4.68)$$

$$\mu_{Ls}^- = R_s \mu_{Ls}^+ + R_{sf} \mu_{L-s}^+ + T_s \mu_{Rs}^- + T_{sf} \mu_{R-s}^- \quad (4.69)$$

$$J_{1Rs}^+ = t_s J_{1Ls}^+ + t_{sf} J_{1L-s}^+ - r_s J_{1Rs}^- - r_{sf} J_{1R-s}^- \quad (4.70)$$

$$J_{1Ls}^- = t_s J_{1Rs}^- + t_{sf} J_{1R-s}^- - r_s J_{1Ls}^+ - r_{sf} J_{1L-s}^+ \quad (4.71)$$

et qui sont découplées en potentiel et en courants anisotropes. En particulier, il y a conservation séparée des quantités

$$\delta\mu = \sum_s (\mu_s^+ - \mu_s^-) \quad J_1 = \sum_s (J_{1s}^+ + J_{1s}^-) \quad (4.72)$$

avec cette approximation.

Les conditions de connexion aux réservoirs s'écrivent naturellement en terme de potentiels électrochimiques sous la forme :

– **Le réservoir de gauche :**

$$\mu_s^+ = V_1 \quad J_{1s}^+ = 0 \quad (4.73)$$

– **Le réservoir de droite :**

$$\mu_s^- = V_2 \quad J_{1s}^- = 0 \quad (4.74)$$

Avec ces conditions d'interface, on peut ainsi déterminer les potentiels électrochimiques chiraux et les courants anisotropes sans faire appel aux effets d'écrantages.

### 4.2.5 Potentiel électrochimique généralisé

Comme pour le transport de charge, en introduisant le potentiel électrochimique du modèle de Valet-Fert :

$$\bar{\mu}_s(x) = V(x) + \frac{D_s}{\sigma_{ds}} n_s(x) \quad (4.75)$$

on peut alors exprimer les courants polarisés en spin sous la forme :

$$J_s = -\sigma_{ds} \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} - s \frac{\lambda_s \sigma_s}{\ell_{sf}} \frac{\partial m}{\partial x} \quad (4.76)$$

Dans ces expressions, on a introduit l'accumulation de spin  $m$  et le potentiel électrochimique généralisé  $\Phi_s$  définies par :

$$\Phi_s = \bar{\mu}_s - \frac{\lambda_s^2}{12} \frac{\partial^2 \bar{\mu}_s}{\partial x^2} \quad m = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow \quad (4.77)$$

Dans la relation 4.76, le premier terme est une généralisation directe du modèle de Valet-Fert et le point important réside dans le second terme qui montre que les courants par spin sont couplés à travers le gradient de l'accumulation de spin  $\partial_x m$ . Les courants ne sont plus découplés de spin.

A partir des expressions des grandeurs macroscopiques, on montre que les potentiels  $\bar{\mu}_s$  s'écrivent sous la forme :

$$\bar{\mu}_s(x) = \frac{(\lambda_s + \lambda_{-s}) J_c}{(\sigma_{ds} + \sigma_{d-s})} \left[ \frac{d}{4} - \frac{x}{(\lambda_s + \lambda_{-s})} + s \sum_{i=1}^3 \frac{6\ell_i^2 (\lambda_s^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_s \ell_{sf} (\lambda_s^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \right] \quad (4.78)$$

ce qui permet d'en déduire les expressions des potentiels généralisés  $\Phi_s$  :

$$\Phi_s(x) = \frac{(\lambda_s + \lambda_{-s}) J_c}{(\sigma_{ds} + \sigma_{d-s})} \left[ \frac{d}{4} - \frac{x}{(\lambda_s + \lambda_{-s})} - s \sum_{i=1}^3 \frac{(\lambda_s^2 - 3\ell_i^2)}{2\lambda_s \ell_{sf}} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \right] \quad (4.79)$$

### 4.2.6 La limite Valet-Fert

De la même façon que pour le transport de charge, on peut dériver la limite dérive-diffusion du modèle collisionnel polarisé en spin. On retrouve alors le modèle Valet-Fert muni de conditions d'interface qui ont la structure de celles du modèle Valet-Fert.

Pour obtenir les équations de transport dans cette limite, il faut utiliser les équations 4.30 à 4.34 de la représentation non chirale des équations de transport dans lesquels on utilise les relations de changement de base :

$$n_s^\pm(x) = \frac{n_s(x)}{2} \pm \frac{3J_s(x)}{4v_f} \quad J_{1s}^\pm(x) = \frac{J_s(x)}{8} \quad (4.80)$$

qui ne sont rien d'autre que l'extension en spin des relations 2.191. Il faut utiliser également le fait que la limite dérive-diffusion correspond à une limite de nombre de Knudsen nul ( $\kappa_s = \frac{\ell_s}{\Delta} = \kappa_{sf} = \frac{\ell_{sf}}{\Delta} = 0$  où  $\Delta$  est l'épaisseur de la couche). La prise simultanée de ces deux limites est indispensable pour restaurer les bonnes équations de volume. Cette procédure restitue alors les équations de transport de volume 4.15 et 4.16 du modèle Valet-Fert.

Pour obtenir les conditions d'interface dans cette limite, il suffit de procéder comme pour le transport de charge. On utilise les équations d'interface portant sur les courants chiraux dans lesquelles on suppose que les coefficients anisotropes  $r_s, t_s, t_{sf}, r_{sf}$  sont égaux respectivement aux paramètres isotropes  $R_s, T_s, T_{sf}, R_{sf}$  ainsi que les formules 4.80 de changement de base de projection. On aboutit alors à un jeu de conditions d'interface adapté pour le modèle Valet-Fert. Celles-ci peuvent alors être écrites en termes de potentiels électrochimiques et prennent la forme

– **Saut de potentiels électrochimique par état de spin :**

$$\mu_{Ls} - \mu_{Rs} = r_s \frac{(I_{Rs} + I_{Ls})}{2} + r_{sf} \frac{(I_{R-s} + I_{L-s})}{2} \quad (4.81)$$

Dans cette équations, les résistances d'interface sont données par les relations :

$$r_s = 2R_{sh}\Sigma_s \quad r_{sf} = 2R_{sh}\Sigma_{sf} \quad (4.82)$$

où  $R_{sh}$  est la résistance de Sharvin et  $\Sigma_s$  et  $\Sigma_{sf}$  sont donnés respectivement par 4.63 et 4.64. On a également introduit  $I_s = J_s S$  où  $S$  est la section transverse du circuit.

– **La conservation du courant :**

$$I_{cR} = I_{cL} \quad (4.83)$$

$$I_{mL} - I_{mR} = \frac{2(R_{sf} + T_{sf})}{R_{sh}(T_\uparrow + T_\downarrow + R_\uparrow + R_\downarrow)} (\Delta\mu_L + \Delta\mu_R) \quad (4.84)$$

où l'on a introduit le courant de spin  $I_m = I_\uparrow - I_\downarrow$  et l'accumulation de spin  $\Delta\mu = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ . De la même façon, on a introduit l'intensité du courant  $I_s = J_s S$  où  $S$  est la section transverse du circuit.



Ainsi la limite dérive-diffusion du modèle collisionnel fournit des expressions analytiques pour les résistances d'interface du modèle Valet-Fert en fonction des différents coefficients de transmission de l'interface. On remarquera la dépendance non triviale de ces résistances en fonctions des coefficients de transmission et de réflexion étant donnée la complexité des facteurs  $\Sigma_s$  et  $\Sigma_{sf}$ . En particulier, on constate que la résistance de spin-flip s'annule lorsque le coefficient de réflexion de spin-flip  $R_{sf}$  est égal au coefficient de transmission spin-flip  $T_{sf}$ . Dans ce cas, tout ce qui est perdu par transmission spin flip est regagné par les processus de réflexion spin-flip et tout ce passe donc comme s'il n'existait pas de spin-flip à l'interface.

Concernant les équations de connexion aux réservoirs, elles s'obtiennent en imposant la nullité des courants entrants dans lesquelles on injecte les relations de changement de base 4.80. On obtient alors les équations de connexion :

– **Le réservoir de gauche :**

$$\mu_s + R_{sh}I_s = V_1 \quad (4.85)$$

– **Le réservoir de droite :**

$$\mu_s - R_{sh}I_s = V_2 \quad (4.86)$$

Ainsi, l'utilisation de ces conditions d'interfaces permettent de résoudre un multicouche quelconque avec une approche de type dérive-diffusion.

### 4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la polarisation en spin du modèle collisionnel. Nous avons ainsi pu montrer que dans le régime diffusif, les courants par état de spin sont couplés par le gradient d'accumulation de spin et des expressions pour les résistances d'interface du modèle Valet-Fert ont été dérivées. Comme indiqué dans l'introduction, nous avons simplement présentée le modèle pour les raisons qui suivent. Jusqu'à présent, nous n'avons pas remarqué de différences significatives existant entre le modèle collisionnel polarisé en spin et le modèle Valet-Fert. En particulier, nous avons reproduit tous les comportements en épaisseurs prédits pour la magnétorésistance par le modèle Valet-Fert. La comparaison entre les deux modèles fait encore l'objet d'études et nous essayons d'établir des résultats analytiques permettant de mettre en évidence les corrections de libre parcours moyen<sup>1</sup> sur la magnétorésistance. Ces résultats seront présentés prochainement dans une publication.

1. de la même façon qu'au chapitre précédent

## Chapitre 5

# Modèle collisionnel et transfert radiatif

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Transfert radiatif . . . . .</b>	<b>97</b>
<b>5.2</b>	<b>Le problème de Milne . . . . .</b>	<b>102</b>
<b>5.3</b>	<b>La méthode des flux . . . . .</b>	<b>110</b>
<b>5.4</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>115</b>

---

Le modèle collisionnel que nous avons introduit au cours des chapitres précédents permet une compréhension plus aisée du transport électronique dans les structures multicouche de type CPP. En particulier, l'introduction des chiralités a permis un meilleur traitement des effets d'interfaces et d'unifier les régimes de transport balistique incohérent et diffusif sous un même formalisme. Les idées du modèle collisionnel ne sont pas propres au transport électrique et peuvent être adaptées à d'autres types de transport comme le transport lumineux. En effet, il existe une similitude de forme entre les équations régissant la propagation d'une onde dans un milieu désordonné ([178] à [207], [253], [254] et [245]) et celles du transport électronique. Ainsi, les concepts du modèle collisionnel peuvent s'appliquer sans modifications majeures au transport photonique. Pour ce domaine, la notion de chiralité est essentielle dans la mesure où la distinction entre rayonnement incident, réfléchi et transmis nécessite de savoir séparer les photons suivant leur direction de propagation respective. Il est intéressant de remarquer que la littérature sur le sujet ([178] à [207], [253]) contient les mêmes problèmes que nous avons cherché à résoudre au cours de cette thèse. En particulier, la notion de chiralité fait déjà son apparition ([253] et [178] à [183]), la question des conditions de bords et d'interfaces a été regardée de multiples façons ([187] à [201]) et des approches équivalentes au modèle dérive-diffusion ([202], [203], [253] et [245]) sont également présentes. Dans toutes ces études, le traitement analytique des chiralités ainsi que la compatibilité avec les approches diffusives ont toujours été quelque chose de problématique.

Dans ce chapitre, nous allons résoudre cela en développant un modèle de transport chirale pour l'intensité lumineuse. Dans la première partie, nous présenterons succinctement le transfert radiatif et appliquerons la technique de projection sur

les polynômes de Legendre décalés à ce domaine. Nous revisitons ensuite un vieux problème, le problème de Milne ([51] à [59]), afin de lui donner une nouvelle solution et de montrer le rôle fondamental des chiralités. La dernière partie est consacrée à la méthode des flux initialement introduite pour le transport de la lumière ([253]) et adaptée ensuite au transport électronique par McKelvey ([29] à [37]) puis plus récemment par Lundstrom ([38] à [42]) et nous montrons que cette approche n'est qu'un cas particulier du modèle collisionnel.

## 5.1 Transfert radiatif

Cette première partie est consacrée à la propagation du rayonnement dans un milieu désordonné (transfert radiatif). Nous commençons par introduire la description du rayonnement dans un milieu aléatoire puis nous développons un modèle de transport macroscopique en utilisant les idées du modèle collisionnel.

### 5.1.1 Rayonnement dans un milieu désordonné

Le transfert radiatif vise à comprendre la propagation du rayonnement électromagnétique dans des milieux interagissant avec celui-ci (diffusions multiples). Dans ces milieux désordonnés, le rayonnement subit de multiples collisions et le transport devient incohérent ([253], [245]). Les photons sont alors diffusés (changement de direction de propagation) et à la différence des électrons, ils peuvent être absorbés ou émis<sup>1</sup> (émission induite) par le milieu. Ainsi, vis-à-vis du rayonnement, les milieux matériels sont séparés en trois catégories ([254]) :

- **Un milieu transparent** est un milieu qui n'interagit pas avec le rayonnement. Il n'émet pas, n'absorbe pas, ne réfléchit pas et ne diffuse pas le rayonnement. Tout rayonnement incident est transmis quelles que soient sa direction et sa fréquence.
- **Un corps opaque** ne transmet aucun rayonnement incident. Le rayonnement est soit complètement absorbé, soit complètement réfléchi au niveau de sa surface d'incidence du rayonnement. Dans la pratique, un corps est dit opaque lorsque la longueur de pénétration du rayonnement est faible devant une dimension caractéristique du système (typiquement son épaisseur).
- **Un milieu semi-transparent** réfléchit, absorbe, émet, diffuse ou transmet sur une longueur finie un rayonnement incident.

Les milieux opaques et transparents ne constituent en fait que deux cas limites et le transfert radiatif vise à décrire la propagation du rayonnement dans les milieux dit semi-transparent. Pour ces milieux, les diffusions multiples rend alors pertinent une description moyennée du rayonnement.

### 5.1.2 Luminance et équation de transfert radiatif

Pour caractériser le rayonnement, on introduit la luminance monochromatique directionnelle<sup>2</sup>  $L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$  qu'on appellera simplement luminance dans la suite ([202], [203], [253], [254] ou encore [251]). Cette quantité constitue

1. on regroupe généralement sous le nom d'absorption ([254]) l'effet globalisé absorption + émission induite.

2. appelé aussi intensité spécifique monochromatique et qu'on note également  $I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)$ .

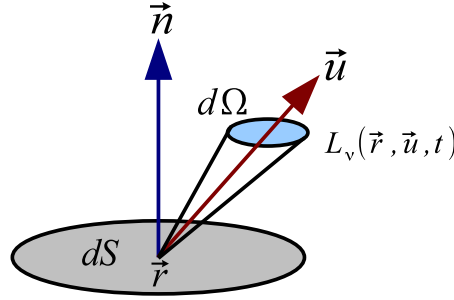


FIGURE 5.1 – Géométrie utilisée pour définir la luminance

l'analogie radiatif de la fonction de distribution introduite pour le transport électrique.

Par définition, la luminance permet d'écrire le flux d'énergie radiative monochromatique  $P_\nu$  traversant un élément de surface  $dS$  (voir la figure 5.1) centré au point  $\mathbf{r}$  dans un angle solide  $d\Omega$  centré sur la direction  $\mathbf{u}$  dans un intervalle de fréquences  $[\nu, \nu + d\nu]$  et au temps  $t$  sous la forme :

$$P_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS d\nu d\Omega \quad (5.1)$$

L'élément d'intégration  $d\Omega$  correspond à l'élément d'intégration associé au vecteur unitaire  $\mathbf{u}$ . La luminance s'exprime en  $W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1} \cdot Hz^{-1}$  et s'interprète comme le flux d'énergie transporté par un rayon lumineux. Cette définition utilise l'aspect ondulatoire du rayonnement électromagnétique et la luminance peut également être introduite à partir d'une description corpusculaire du rayonnement ([254] et [251]) grâce à la fonction de distribution des photons  $f_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  par la relation :

$$L_\nu = \frac{h^4}{c^2} \nu^3 f_\nu \quad (5.2)$$

On notera que la luminance est définie pour une fréquence  $\nu$  donnée.

Des exemples de luminances sont donnés par :

- la luminance thermique, caractéristique de l'équilibre thermodynamique (loi de Planck) :

$$L_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1} \quad (5.3)$$

où  $T$  est la température de la matière avec laquelle le rayonnement est en équilibre,  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide,  $h$  la constante de Planck et  $k_b$  la constante de Boltzmann.

- la luminance associée à une onde collimatée se dirigeant parallèlement à l'axe des  $x$  :

$$L_\nu(\theta) = \frac{J_0}{2\pi} \delta(\cos\theta - 1) \quad (5.4)$$

La luminance vérifie l'équation de transfert radiative :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial L}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} L = -(\mu_a + \mu_d) L + \frac{\mu_d}{4\pi} \int d\Omega' p(\mathbf{u}, \mathbf{u}') L(\Omega') \quad (5.5)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière,  $\mu_d$  le coefficient de diffusion (équivalent du libre parcours moyen) et  $\mu_a$  le coefficient d'absorption. La fonction  $p(\mathbf{u}, \mathbf{u}')$  est appelée fonction de phase en transfert radiatif et s'identifie au taux de collision du transport électronique. Elle vérifie la règle de somme :

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega' p(\mathbf{u}, \mathbf{u}') = 1 \quad (5.6)$$

Dans la suite, on suppose que la fonction de phase est égale à l'unité traduisant ainsi l'isotropie des collisions. On note que  $\mu_d$  et  $\mu_a$  dépendent de la fréquence  $\nu$  et on appelle coefficient d'extinction  $\mu_e$  la somme de ces deux coefficients :

$$\mu_e = \mu_d + \mu_a \quad (5.7)$$

A partir de la luminance, on détermine les grandeurs macroscopiques<sup>3</sup> caractéristiques du rayonnement. En particulier, la densité d'énergie radiative est fournie par l'intégrale angulaire de la luminance :

$$u_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \int d\Omega L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \quad (5.8)$$

et le flux d'énergie radiative par la moyenne sur toutes les directions de propagations  $\mathbf{u}$  :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int d\Omega \mathbf{u} L_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \quad (5.9)$$

Ces grandeurs macroscopiques sont représentatives d'une fréquence donnée et l'obtention de grandeurs globales nécessite une intégration sur toutes les fréquences ( $\nu \in [0, +\infty]$ ). Notons que l'intensité monochromatique moyenne du rayonnement est liée à la densité d'énergie par la relation :

$$I(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} u_{\text{rad}}(\mathbf{r}, t) \quad (5.10)$$

et que le flux d'énergie radiative représente la moyenne sur le désordre du vecteur de Poynting ([253]).

On note les similitudes de forme entre les équations du transfert radiatif et celles du modèle collisionnel puisque la luminance constitue l'analogie de la fonction de distribution électronique et l'équation de transfert radiatif 5.5 a exactement la forme d'une équation de Boltzmann. La densité d'énergie s'apparente donc à l'accumulation électronique et le flux radiatif au courant de charge. On comprend dès lors que les idées du modèle collisionnel peuvent s'appliquer sans modifications au transport lumineux ce que nous montrons maintenant.

### 5.1.3 Equations de transport macroscopique

Dans ce paragraphe, nous appliquons les idées du modèle collisionnel pour construire un modèle de transport chirale pour les structures équivalentes à celles des multicouches CPP<sup>4</sup> du transport électrique. On suppose donc un transport unidimensionnel défini par l'équation de transfert radiative :

$$\cos \theta \frac{\partial L}{\partial x} = -\mu_e L + \frac{\mu_d}{2} \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' L(x, \theta') \quad (5.11)$$

3. appelées également grandeurs photométriques.

4. appelé plutôt géométrie slab dans ce contexte.

Il est bon de noter que contrairement au transport électronique, la présence d'absorption supprime la conservation du courant. Le courant radiatif n'est donc plus une constante uniforme et dépend de la position.

Avant d'introduire les chiralités, nous rappelons brièvement le modèle de transport diffusif.

### Approche diffusive

Comme pour le modèle dérive-diffusion, un modèle de transport diffusif peut être dérivé de l'équation 5.11 en décomposant la luminance sur les deux premiers polynômes de Legendre ordinaires :

$$L(x, \theta) = L_0(x) + L_1(x)P_1(\cos \theta) \quad (5.12)$$

En utilisant les définitions 5.8 et 5.9, on peut alors relier les luminances  $L_0$  et  $L_1$  aux grandeurs macroscopiques :

$$L_0(x) = \frac{c}{4\pi}u(x) \quad L_1(x) = \frac{3}{4\pi}J(x) \quad (5.13)$$

et la projection tronquée à l'ordre un de l'équation de transfert radiatif 5.11 conduit alors au modèle de transport diffusif :

$$J(x) = -\frac{c}{3\mu_e} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\mu_a c u(x) \quad (5.15)$$

dont la structure est exactement celle du modèle dérive-diffusion du transport électrique. A cette approximation<sup>5</sup>, la densité d'énergie radiative vérifie l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 3\mu_e \mu_a u = 0 \quad (5.16)$$

### Approche chirale

Comme pour le transport électronique, nous allons séparer le rayonnement se propageant vers la droite (caractérisé par la luminance  $L^+$ ) de celui se propageant vers la gauche (décrit par la luminance  $L^-$ ). Ainsi, l'équation de transfert radiatif 5.5 se scinde en deux pour donner :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial L^\pm}{\partial x} = -(\mu_d + \mu_a) L^\pm + \frac{\mu_d}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [L^+(x, \theta') + L^-(x, \theta')] \quad (5.17)$$

La densité d'énergie radiative et le courant radiatif sont alors donnés par :

$$u(x) = \frac{2\pi}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta (L^+(x, \theta) + L^-(x, \theta)) \quad (5.18)$$

$$J(x) = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta (L^+(x, \theta) - L^-(x, \theta)) \quad (5.19)$$

5. dite d'Eddington en astrophysique.

Pour résoudre les équations 5.17, les luminances  $L^\pm$  sont décomposées sur les polynômes de Legendre décalés :

$$L^\pm(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} L_n^\pm(x) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (5.20)$$

et comme pour le transport électronique, on ne conserve que les deux premières composantes de ce développement puisque l'énergie  $u$  et le flux radiatif  $J$  ne sont fonction que des deux premières composantes  $L_0^\pm$  et  $L_1^\pm$  :

– **La densité d'énergie radiative :**

$$u(x) = u^+(x) + u^-(x) \quad u^\pm(x) = \frac{2\pi}{c} L_0^\pm(x) \quad (5.21)$$

– **Le courant radiatif :**

$$J(x) = J^+(x) + J^-(x) \quad J^\pm(x) = \pm\pi \left( L_0^\pm(x) + \frac{1}{3} L_1^\pm(x) \right) \quad (5.22)$$

Par comparaison avec le transport électronique, on introduit la composante isotrope  $J_0^\pm$  et anisotrope  $J_1^\pm$  du flux radiatif :

$$J_0^\pm(x) = \pm\pi L_0^\pm(x) = \pm\frac{c}{2} u^\pm(x) \quad (5.23)$$

$$J_1^\pm(x) = \pm\frac{\pi}{3} L_1^\pm(x) \quad (5.24)$$

qui permettent d'écrire :

$$J^\pm(x) = J_0^\pm(x) + J_1^\pm(x) = \pm\frac{c}{2} u^\pm(x) + J_1^\pm(x) \quad (5.25)$$

En utilisant les définitions des différentes grandeurs macroscopiques, la projection de l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Legendre décalés tronquée à l'ordre un conduit à des équations de transport portant directement sur les intensités et les flux diffusifs chiraux :

$$\frac{\partial u^\pm}{\partial x} = \frac{3\mu_d}{2} (u^- - u^+) \mp 3\mu_a u^\pm + \frac{6\mu_e}{c} J_1^\pm \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial J_1^\pm}{\partial x} \pm 3\mu_e J_1^\pm = \pm \frac{c\mu_d}{4} (u^+ - u^-) + \frac{c\mu_a}{2} u^\pm \quad (5.27)$$

qui sont complètement équivalentes à celles développées pour le transport électrique.

Les équations de transport 5.26 à 5.27 constituent les équations relatives à la représentation chirale. Comme pour le transport de charge, on peut définir une représentation non chirale en introduisant les quantités :

$$u(x) = u^+(x) + u^-(x) \quad \delta u(x) = u^+(x) - u^-(x) \quad (5.28)$$

$$J(x) = J^+(x) + J^-(x) \quad J_p(x) = J^+(x) - J^-(x) \quad (5.29)$$

Les équations de transport prennent alors la forme équivalente :

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -c\mu_e \delta u \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -c\mu_a u \quad (5.31)$$

$$J_p(x) = \frac{c(\mu_a + \mu_e)}{2\mu_e} u(x) + \frac{c}{6\mu_e} \frac{\partial \delta u}{\partial x} \quad (5.32)$$

$$J(x) = c\delta u(x) + \frac{c}{6\mu_e} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.33)$$

On remarque que la présence d'absorption neutralise la conservation du courant (équation 5.31) et montre que la densité constitue une source de courant.

A partir des équations de transport, on peut montrer que le courant radiatif  $J$  dérive d'un potentiel  $\Phi$  :

$$J(x) = -\frac{c(\mu_a + \mu_e)}{3\mu_e^2} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad \Phi(x) = u(x) - \frac{1}{12\mu_e(\mu_e + \mu_a)} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.34)$$

et on en déduit que la densité d'énergie radiative vérifie maintenant une équation d'ordre quatre :

$$\frac{1}{12\mu_e} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - (\mu_a + \mu_e) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 3\mu_e^2 \mu_a u = 0 \quad (5.35)$$

Comme pour le transport électronique, on passe du modèle chiral au modèle diffusif en utilisant les relations :

$$u^+(x) = \frac{2\pi}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta L(x, \theta) = \frac{u(x)}{2} + \frac{3J(x)}{4c} \quad (5.36)$$

$$u^-(x) = \frac{2\pi}{c} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\theta \sin \theta L(x, \theta) = \frac{u(x)}{2} - \frac{3J(x)}{4c} \quad (5.37)$$

$$J^+(x) = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta L(x, \theta) = \frac{J(x)}{2} + \frac{c}{4} u(x) \quad (5.38)$$

$$J^-(x) = 2\pi \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta L(x, \theta) = \frac{J(x)}{2} - \frac{c}{4} u(x) \quad (5.39)$$

qui expriment les quantités chirales en fonction des grandeurs macroscopiques associées au modèle de transport diffusif.

## 5.2 Le problème de Milne

Au paragraphe précédent, nous avons dérivé un modèle de transport chiral pour le transport de la lumière dans un milieu diffusant et absorbant en appliquant sans grande difficulté la méthode de projection sur les polynômes de Legendre décalés du modèle collisionnel. Pour compléter ce modèle, on peut également dériver les conditions d'interface pour les grandeurs chirales en introduisant des intégrales de collision pour la luminance au niveau des interfaces



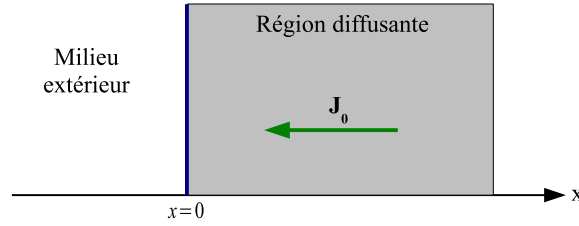


FIGURE 5.2 – Géométrie du problème de Milne. Le milieu diffusant est supposé semi-infini dans la direction des  $x$  positifs. Un flux de particules provenant de l'infini se dirige vers l'interface séparant le milieu du monde extérieur. Le courant  $J_0$  est une constante par absence d'absorption.

en incorporant les phénomènes d'absorption. L'extension des conditions d'interface étant, comme pour les équations de volume, assez immédiate, nous ne les présentons pas. Dans cette section, nous allons présenter une application simple du modèle développé pour la lumière en revisitant un vieux problème, le problème de Milne ([51] à [59]). Celui-ci va nous permettre en particulier de montrer le rôle fondamental des chiralités pour les phénomènes de transport.

### 5.2.1 Présentation du problème

Le problème de Milne s'intéresse à la propagation de particules non chargées dans un milieu diffusant supposé semi-infini séparé du milieu extérieur par une interface placée à l'origine des positions (figure 5.2). Les particules se déplacent en direction de l'interface et on souhaite comprendre la structure des grandeurs macroscopiques au voisinage de l'interface. Le milieu étant purement diffusant, les processus d'absorption sont donc absents et le courant, qu'on notera  $J_0$ , est donc une quantité indépendante de la position. Cette problématique a surtout concerné la diffusion des neutrons ([51] à [59]) mais elle est applicable dès lors que les particules sont non chargées.

Le problème de Milne est sans doute l'un des premiers problèmes de propagation de particules dans un milieu diffusant pour lequel la notion de chiralité est nécessaire. Étant applicable pour tout type de particules non chargées, nous allons le présenter en adoptant des notations transparentes utilisables pour des particules soient massives (neutron) ou non (photon). Ainsi, le problème de Milne est défini par l'équation de "Boltzmann" :

$$\cos \theta \frac{\partial h}{\partial x} = -h + \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' h(x, \theta') \quad (5.40)$$

munie des conditions de bords :

$$h(x = 0, \theta) = 0 \quad \forall \theta > 0 \quad (5.41)$$

$$h(x = +\infty, \theta) = 0 \quad \forall \theta < 0 \quad (5.42)$$

où  $h$  désigne aussi bien une luminance qu'une fonction de distribution et il faut comprendre que la coordonnée  $x$  a été adimensionnée par le libre parcours

moyen. On remarque que les conditions de bords nécessitent la séparation des particules suivant leur direction de propagation et traduisent l'idée qu'aucune particule ne pénètre le milieu à ses extrémités.

A partir de la fonction  $h$ , on définit les trois premiers moments (densité, courant et pression) :

$$n(x) = \int_0^\pi d\theta \sin \theta h(x, \theta) \quad J_0 = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta h(x, \theta) \quad (5.43)$$

$$K(x) = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos^2 \theta h(x, \theta) \quad (5.44)$$

L'intérêt de ce problème est qu'on peut démontrer un certain nombre de résultats exacts portant sur le premier moment ( $n(x)$ ) de la fonction  $h$  fournissant ainsi des critères de validité pour toute solution approchée de l'équation de Boltzmann. Ces résultats ([57], [51], [54]) ont été obtenus en utilisant une technique relativement complexe basée sur la transformée de Laplace et la méthode de Wiener-Hopf ([255]) et nous les résumons ici.

En introduisant la fonction de Green, on peut montrer que les trois quantités macroscopiques vérifient les équations intégrales :

$$n(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dx' n(x') E_1(|x - x'|) \quad (5.45)$$

$$J_0 = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dx' n(x') E_2(|x - x'|) \quad (5.46)$$

$$K(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dx' n(x') E_3(|z - x'|) \quad (5.47)$$

où  $E_n$  désigne la fonction exponentielle intégrale (annexe D.3). On constate en particulier que la connaissance de la densité  $n(x)$  donne accès à toutes les autres grandeurs macroscopiques. De plus, on remarque que les relations entre les différentes grandeurs moyennes sont différentes de celles qu'on obtient avec les modèles de transport (diffusif ou chiral). Ces équations intégrales sont à l'origine de diverses approches variationnelles du problème de Milne ([55] et [53]).

En intégrant formellement l'équation de Boltzmann 5.40, on aboutit à l'équation de conservation du courant :

$$\frac{\partial J_0}{\partial x} = 0 \quad (5.48)$$

prouvant que  $J_0$  est une constante indépendante de la position. En multipliant ensuite l'équation de Boltzmann 5.40 par  $\cos \theta$  et en l'intégrant formellement, on obtient une équation différentielle liant la pression  $K$  au courant  $J_0$  :

$$\frac{\partial K}{\partial x} = -J_0 \Rightarrow K(x) = -J_0 (x + x_0) \quad (5.49)$$

dont la solution est immédiate puisque le courant est constant. On aboutit donc à l'expression exacte de la pression  $K$  qui évolue linéairement avec la position.

La constante d'intégration  $x_0$  étant fourni par l'équation

$$x_0 = -\frac{K(0)}{J_0} = -\frac{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta h(0, \theta)}{\int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta h(x, \theta)} \quad (5.50)$$

compte tenu des conditions de bords pour la fonction  $h$ .

A partir de la forme linéaire de  $K$ , on peut démontrer que la densité possède également une dépendance en partie linéaire avec la coordonnée  $x$ . Pour le montrer, nous présentons un raccourci utilisant la méthode de projection. En effet, en décomposant la fonction  $h$  sur les polynômes de Legendre ordinaire :

$$h(z, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} h_{\ell}(z) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (5.51)$$

ainsi que la relation :

$$\cos^2 \theta = \frac{2}{3} P_2 + \frac{1}{3} P_0 \quad (5.52)$$

on aboutit alors, en utilisant la définition 5.44 de  $K$ , à l'expression suivante de la densité :

$$n(x) = -3J_0(x + x_0) - \frac{4}{5} h_2(x) \quad (5.53)$$

faisant intervenir la composante d'ordre deux de la fonction  $h$ . Lorsque  $x$  tend vers l'infini, la fonction  $h_2$  tend vers zéro<sup>6</sup> et la densité évolue linéairement avec la position. Ainsi, si on extrapole ce comportement jusqu'à l'interface, on remarque que la densité s'annule à l'extérieur du milieu, en  $x = -x_0$ . La méthode basée sur la transformée de Laplace et la méthode de Wiener-Hopf ([57], [51], [54]) permet alors d'accéder à l'expression exacte de  $x_0$  :

$$x_0 = \frac{6}{\pi^2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{3}{x^2} - \frac{1}{1 - x \cot x} \right) dx \approx 0.71044609 \quad (5.54)$$

et la densité s'annule donc à une distance de 0.71 fois le libre parcours par rapport à l'interface.  $x_0$  est donc appelé longueur d'extrapolation. D'autre part, avec cette même méthode, on peut démontrer que la densité vaut exactement :

$$n(0) = -\sqrt{3} J_0 \quad (5.55)$$

au niveau de l'interface.

Ainsi, la solution du problème de Milne fournit l'expression exacte de la densité à l'interface ainsi qu'à l'infini. Ces résultats fournissent ainsi des critères de fiabilité pour toute méthode approchée de l'équation de Boltzmann et nous allons maintenant les comparer avec ceux obtenus par les méthodes projectives (chirale et diffusive) utilisées dans la pratique pour le cas du transport lumineux.

6. une façon de s'en convaincre est que la composante  $h_2$  décrit un effet de basse épaisseur.

### 5.2.2 L'apport des chiralités

En l'absence d'absorption, les solutions des équations de transport chirales 5.26 à 5.27 s'écrivent :

$$u^\pm(x) = \frac{1}{2c} \left[ \lambda_3 \pm \frac{3J_0}{2} (1 \mp 2\mu_d x) - 3 \left( 1 \pm \frac{2}{\sqrt{12}} \right) \lambda_1 e^{-x\mu_d\sqrt{12}} - 3 \left( 1 \mp \frac{2}{\sqrt{12}} \right) \lambda_2 e^{x\mu_d\sqrt{12}} \right] \quad (5.56)$$

$$J_d^\pm(x) = \frac{1}{2} \left[ \frac{J_0}{4} \pm \left( 1 \pm \frac{3}{\sqrt{12}} \right) \lambda_1 e^{-x\mu_d\sqrt{12}} \pm \left( 1 \mp \frac{3}{\sqrt{12}} \right) \lambda_2 e^{x\mu_d\sqrt{12}} \right] \quad (5.57)$$

dans lesquelles on a introduit le courant radiatif global  $J_0$ . Les constantes  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  et  $\lambda_3$  sont alors déterminées par les conditions de bords que l'on spécifie maintenant.

La convergence en  $x = +\infty$  impose la condition :

$$\lambda_2 = 0 \quad (5.58)$$

la condition de bord 5.41 au niveau de l'interface entraîne, comme pour le transport électrique l'annulation des grandeurs macroscopiques pour les photons entrant dans la structure :

$$u^+(0) = 0 \quad J_1^+(0) = 0 \quad (5.59)$$

On en déduit ainsi les expressions des constantes  $\lambda_1$  et  $\lambda_3$  :

$$\lambda_1 = -J_0 \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \lambda_3 = -3J_0 \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \quad (5.60)$$

Avec ces expressions, on en déduit alors celle du moment d'ordre zéro qui est ici donné par la densité d'énergie radiative  $u(x) = u^+(x) + u^-(x)$  :

$$u(x) = -\frac{3J_0}{c} \left[ \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) + \mu_d x - \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) e^{-x\mu_d\sqrt{12}} \right] \quad (5.61)$$

A partir de cette expression, on en déduit que la densité d'énergie à un comportement linéaire lorsque  $x$  tend vers l'infini :

$$u(x = +\infty) = -\frac{3J_0}{c} [\mu_d x + x_0] \quad (5.62)$$

où la longueur d'extrapolation est fournie par l'expression approchée

$$x_0 = 1 - \frac{\sqrt{3}}{6} \approx 0.711324865 \quad (5.63)$$

qui est en excellent accord avec la valeur exacte 5.54. D'autre part, on remarque que la valeur en  $x = 0$  s'écrit :

$$u(0) = -\sqrt{3} \frac{J_0}{c} \quad (5.64)$$

ce qui est le résultat exact.

Bien que le modèle de transport chiral constitue une solution approchée de l'équation de Boltzmann, on voit à travers cet exemple qu'il contient une bonne partie de l'information contenue dans celle-ci puisqu'il fournit la valeur exacte de la densité au niveau de l'interface ainsi qu'une expression approchée de la longueur d'extrapolation très proche de la valeur exacte (écart à partir du troisième chiffre après la virgule). Il est intéressant de regarder ce que donne une approche diffusive (projection sur les polynômes de Legendre normaux).

En l'absence d'absorption, les équations 5.14 et 5.15 du modèle diffusif conduisent à l'expression générale suivante de la densité d'énergie radiative :

$$u(x) = -\frac{3J_0}{c}\mu_d x + \lambda_2 \quad (5.65)$$

la constante  $\lambda_2$  est alors fournie par la condition d'interface. N'ayant pas de condition de bord bien définie pour les approches diffusives, on peut regarder deux types de condition d'interface :

– **Annulation de la densité d'énergie radiative entrante :**

$$u^+(0) = 0 \Leftrightarrow u(0) - \frac{1}{2\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.66)$$

qui conduit à l'expression de l'énergie radiative :

$$u(x) = -\frac{3J_0}{c} \left[ \frac{1}{2} + \mu_d x \right] \quad (5.67)$$

et l'on constate que la longueur d'extrapolation et la valeur en zéro sont données par :

$$x_0 = \frac{1}{2} \quad u(0) = -\frac{3}{2} \frac{J_0}{c} \quad (5.68)$$

– **Annulation du flux radiatif entrant :**

$$J^+(0) = 0 \Leftrightarrow u(0) - \frac{2}{3\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.69)$$

Dans ce cas, l'énergie radiative s'écrit :

$$u(x) = -\frac{3J_0}{c} \left[ \frac{2}{3} + \mu_d x \right] \quad (5.70)$$

et les grandeurs d'intérêt sont données par :

$$x_0 = \frac{2}{3} \approx 0.666 \quad u(0) = -2 \frac{J_0}{c} \quad (5.71)$$

Quelque soit la condition d'interface utilisée, on constate que le modèle diffusif ne fournit pas l'accord qu'on obtient avec le modèle chiral. La comparaison de ces deux types de condition d'interface montre que l'annulation de l'énergie entrante fournit la valeur la plus proche pour la densité d'énergie au bord ( $\sqrt{3} \approx 1.732$ ) alors que l'annulation du flux entrant donne la meilleure valeur approchée pour la longueur d'extrapolation. En particulier, le tableau 5.3

Approche	Conditions de bord	$x_0$	$\alpha$
Exacte	$L^+(x=0, \theta) = 0$	0.71044609	$\sqrt{3} \approx 1.732$
Chirale (0 et 1)	$u^+(0) = 0 \quad J^+(0) = 0$	0.7113	$\sqrt{3}$
Non chirale (0 et 1)	$u^+(0) = 0$	0.5	1.5
Non chirale (0 et 1)	$J^+(0) = 0$	0.666	2
Non chirale (0, 1 et 2)	$u^+(0) = 0 \quad J^+(0) = 0$	0.7666	1.5
Non chirale (0, 1 et 2)	$J^+(0) = 0 \quad \Pi^+(0) = 0$	0.75	1.58
Non chirale (0, 1, 2 et 3)	$u^+(0) = 0 \quad J^+(0) = 0$	0.729	1.68
Non chirale (0, 1, 2 et 3)	$J^+(0) = 0 \quad \Pi^+(0) = 0$	0.684	1.91

FIGURE 5.3 – Diverses approximations de la longueur d'extrapolation  $x_0$  et de la densité d'énergie à l'interface ( $u(0) = -\alpha \frac{J_0}{c}$ ). La seconde ligne correspond aux résultats exactes et la troisième correspond à ceux obtenus par le modèle chirale tronqué à l'ordre un. Les lignes suivantes fournissent différentes approximations de  $x_0$  et  $\alpha$  obtenue par projection de l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Legendre ordinaires tronquée à différents ordres (0 et 1, 0, 1 et 2 et 0, 1, 2 et 3). Avec une approche diffusive, il existe toujours un choix dans la condition de bord à utiliser qui conditionne l'approximation obtenue. En particulier, la condition d'annulation de l'intensité entrante ( $L^+(x=0, \theta) = 0$ ) implique celle de toutes les grandeurs macroscopiques associées aux photons entrants et nous testons donc l'annulation de la densité entrante  $u^+$ , du courant entrant  $J^+$  et de la pression entrante  $\Pi^+$  (moyenne de  $\cos^2 \theta$ ). On constate que quelque soit l'ordre de troncature, l'approximation obtenue n'équivaut pas celle de l'approche chirale et que suivant l'approximation retenue le choix des conditions de bord adaptées change.

fournit une comparaison de différentes approximations obtenues par diverses méthodes de résolution et on constate qu'on obtient jamais le niveau d'approximation du modèle chiral.

Remarque : Concernant le transport électrique, le problème de Milne concerne le comportement du potentiel électrochimique pour un milieu diffusif semi-infini connecté en  $x = 0$  à un réservoir. Dans ce cas, on montre que celui-ci s'écrit :

$$\bar{\mu}(x) = V_1 - \frac{\ell J_c}{\sigma_d} \left[ \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) + \frac{x}{\ell} - \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\ell}} \right] \quad (5.72)$$

où  $V_1$  est la valeur du potentiel électrique au niveau du réservoir. On notera en particulier la ressemblance de forme avec l'expression 5.61 de la densité d'énergie radiative. La longueur d'extrapolation est alors donnée par :

$$x_0 = 1 - \frac{\sqrt{3}}{6} - \frac{\sigma_d}{\ell J_c} V_1 \quad (5.73)$$

qui est liée à la valeur du potentiel au bord. La valeur à l'interface s'écrit :

$$\bar{\mu}(0) = V_1 - \sqrt{3} \frac{\ell J_c}{\sigma_d} \quad (5.74)$$

### 5.2.3 Condition de bord mixte

Nous terminons cette partie sur le problème de Milne par quelques remarques sur la notion de condition de bord mixte.

Une condition de bord mixte est une relation qui lie une fonction à sa dérivée au bord d'un milieu. Cette condition prend donc la forme générale :

$$f(0) - \lambda_0 \frac{\partial f}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.75)$$

et le paramètre  $\lambda_0$  est appelé longueur d'extrapolation. De façon générale, ce type de condition est appelé indifféremment condition d'extrapolation, condition de bord mixte ou condition de Robin ([245], [256]) et peut se voir comme une combinaison des conditions de bords de Dirichlet ( $f(0) = 0$ ) et de Neumann ( $\partial_x f(0) = 0$ ).

Ce type de condition de bord est étroitement lié au problème de Milne dans la mesure où si seule la dépendance linéaire de la densité est conservée, celle-ci s'annule donc à l'extérieur du milieu ce qu'on peut traduire par une condition de bord mixte à l'interface :

$$n(-x_0) = 0 \Leftrightarrow n(0) - x_0 \frac{\partial n}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.76)$$

L'extension de ce résultat a alors conduit à l'utilisation de condition de bord de mixte dans des problèmes de transport chiraux traités par des approches plutôt diffusives.

On peut constater que les conditions de bords relatives au modèle de transport diffusif (électrique ou lumineux) conduisent toujours à ce genre de condition de bord. Par exemple, pour la lumière :

$$u^+(0) = 0 \Leftrightarrow u(0) - \frac{1}{2\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.77)$$

ou encore

$$J^+(0) = 0 \Leftrightarrow u(0) - \frac{2}{3\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x}(0) = 0 \quad (5.78)$$

cela tient au fait que dans cette approximation, les quantités chirales sont toujours des combinaisons de la densité et du courant et que le courant s'écrit toujours comme un gradient de la densité.

En présence des chiralités, on peut constater qu'une condition d'annulation pour les quantités chirales impliquent toujours une condition de bord mixte généralisée pour la quantité non chirale correspondante. Par exemple, l'annulation de la densité d'énergie radiative entrante  $u^+$  et du courant anisotrope  $J_1^+$  implique que la densité d'énergie radiative  $u$  vérifie la condition de bord :

$$u(0) - \frac{2}{3\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x}(0) - \frac{1}{18\mu_d^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(0) + \frac{1}{18\mu_d^3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(0) = 0 \quad (5.79)$$

dont on constate qu'elle fait intervenir des dérivées d'ordre élevé de la densité d'énergie. Ainsi, une condition de bord pour une quantité chirale conduit à une condition de bord mixte de type 5.75 uniquement dans une approximation diffusive du transport et ce traduit toujours par une condition de bord mixte généralisée de la forme :

$$u(0) - \sum_n \alpha_n \frac{\partial^n u}{\partial x^n} = 0 \quad (5.80)$$

pour les quantités non chirales d'une théorie chirale du transport. Ceci explique en particulier pourquoi la longueur  $\lambda_0$  correspond rarement à la vraie longueur d'extrapolation (voir le problème de Milne pour s'en convaincre).

## 5.3 La méthode des flux

La difficulté de solutionner l'équation de Boltzmann en présence de chiralité à conduit par le passé au développement de modèles alternatifs plus simples à manipuler. C'est ainsi que la méthode des flux que nous présentons dans cette dernière partie fit son apparition. Cette approche vise à utiliser les idées du transport balistique pour décrire le transport en présence de processus de diffusion. Ce modèle, initialement établi pour la lumière ([253]), a été ensuite adapté par McKelvey et Al ([29] à [37]) puis plus récemment par Lundstrom et Al ([38] à [42] et [43] à [45]) pour décrire le transport électronique dans les semi-conducteurs afin de pouvoir prendre en compte des effets balistique et diffusif. Nous présentons cette méthode des flux ici dans la mesure où cette technique est applicable pour tout type de transport et nous montrons que cette méthode constitue un cas limite du modèle collisionnel. La première partie fournit une présentation générale de cette méthode et la seconde montre comment elle peut être obtenue à partir de l'équation de Boltzmann.



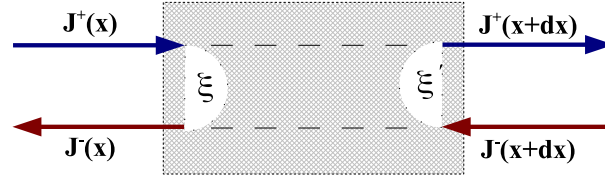


FIGURE 5.4 – Dans la méthode des flux, les collisions rétrodiffusent les courants  $J^+$  et  $J^-$  (schéma empreinté de [38]).

### 5.3.1 Présentation générale de la méthode

La méthode des flux est un modèle de transport alternatif utilisant la notion de chiralité en introduisant deux courants chiraux,  $J^+$  et  $J^-$  qui ont la même signification physique que celle du modèle collisionnel. Ces courants vérifient les équations empiriques de transport :

$$\frac{\partial J^+}{\partial x} = -[\xi + \xi_a] J^+ + \xi' J^- + g^+(x) \quad (5.81)$$

$$\frac{\partial J^-}{\partial x} = -\xi J^+ + [\xi' + \xi_a] J^- + g^-(x) \quad (5.82)$$

qui sont plus simples que l'équation de Boltzmann dans la mesure où la variable angulaire a complètement disparu. Dans ces équations, les coefficients de rétrodiffusion  $\xi$  et  $\xi'$  caractérisent les processus de collision sur les impuretés de volume (figure 5.4) qui sont traités ici de manière balistique en termes de réflexions locales. Les processus d'absorption sont représentés par  $\xi_a$  et les termes sources  $g^\pm(x)$  décrivent la présence d'un éventuel champ de force et/ou de processus émettant des particules. Les paramètres  $\xi$ ,  $\xi'$ ,  $\xi_a$  et  $g^\pm$  caractérisent donc les propriétés de volume du matériau dans lequel les particules se propagent. La signification physique de ces équations est assez transparente puisque les courants chiraux évoluent sous l'action des processus de rétrodiffusion qui effectuent une conversion entre ces courants, les processus d'absorption les atténuant et les termes sources les augmentant.

A ces équations sont associées les équations constitutives :

$$J^\pm = vn^\pm \quad (5.83)$$

qui lie les courants chiraux aux densités de particules chirales associées ( $n^+$  et  $n^-$ ) par l'intermédiaire d'une vitesse caractéristique  $v$  qui dépend du type de particules. Cette relation entre courant et densité chirale est sans doute à l'origine du nom de la méthode des flux puisque les flux (les courants) s'écrivent comme le produit d'une densité de particule par une vitesse conformément à la définition habituelle d'un flux. A partir de ces expressions, le courant  $J$  et la densité  $n$  sont données par les relations :

$$J = J^+ - J^- \quad n = \frac{1}{v} (J^+ + J^-) \quad (5.84)$$

En combinant les équations de transport 5.81 et 5.82 et les relations 5.83 et 5.84, on montre que le courant  $J$  et la densité  $n$  vérifient les équations de transport :

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\xi_a v n + g^+ - g^- \quad (5.85)$$

$$J = \frac{(\xi' - \xi)}{(\xi' + \xi + \xi_a)} v n - \frac{v}{(\xi' + \xi + \xi_a)} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{g^+ + g^-}{(\xi' + \xi + \xi_a)} \quad (5.86)$$

qui ont une structure similaire à celles obtenues par les approches diffusives.

La présentation que nous venons de faire ici de la méthode des flux est très générale dans la mesure où les densités  $n^\pm$  désignent aussi bien une accumulation d'électrons qu'une densité d'énergie radiative et les courants chiraux  $J^\pm$  peuvent donc avoir la signification de courants de charge ou de flux radiatifs. Notons en particulier que nous avons respecté les conventions de signe propre à ce modèle qui sont un peu différentes de celles utilisées dans le modèle collisionnel.

Si les équations de transport 5.81 et 5.82 sont généralement aisées à résoudre, la difficulté de cette approche réside dans la détermination des paramètres de volume  $\xi$ ,  $\xi'$ ,  $\xi_a$  et  $g^\pm$  ainsi que de la vitesse caractéristique  $v$ . Ces grandeurs doivent pouvoir être reliées à des grandeurs connues comme le libre parcours moyen ainsi que les forces en présence. Pour ce faire, nous présentons la méthode introduite par Lundtsrom ([38]) que nous appliquons aux transports de charge et lumineux :

- **Transport électrique** : dans une approche diffusive, le courant et la densité vérifient le modèle dérive-diffusion dont les équations caractéristiques s'écrivent :

$$\frac{\partial J_c}{\partial x} = 0 \quad J_c = \sigma_d E(x) - D \frac{\partial n}{\partial x} \quad (5.87)$$

où  $E$  est le champ électrique. L'idée est alors d'identifier ces équations avec les relations 5.85 et 5.86 issues de la méthode des flux. On obtient alors la correspondance :

$$\xi = \xi' = \frac{3}{2\ell} \quad v = v_f \quad g^+ = g^- = \frac{3\sigma_d}{2\ell} E(x) \quad (5.88)$$

qui déterminent complètement les équations de la méthode des flux. Il est alors intéressant de remarquer les équations 5.81 et 5.82 prennent alors la forme :

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial x} + \frac{\epsilon}{2\lambda_{TF}^2} \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{3}{2\ell} (n^- - n^+) \quad (5.89)$$

qui correspondent exactement aux équations 2.71 et 2.72 du modèle collisionnel dans lesquelles la contribution du diffusif courant a été ignorée.

- **Transport lumineux** : on peut appliquer la même méthode pour le transport lumineux en l'absence d'absorption. Il suffit alors d'identifier les équations 5.85 et 5.86 avec celles issues d'une approche diffusive :

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad J(x) = -\frac{c}{3\mu_d} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.90)$$

Ceci conduit alors à la correspondance :

$$\xi = \xi' = \frac{3}{2}\mu_d \quad v = c \quad g^+ = g^- = 0 \quad (5.91)$$

permettant d'écrire les équations de transport 5.81 et 5.82 sous la forme :

$$\frac{\partial u^\pm}{\partial x} = \frac{3\mu_d}{2} (u^- - u^+) \quad (5.92)$$

qui sont exactement celles obtenues à partir des équations 5.14 et 5.15 du modèle de transport chirale dans lesquelles la contribution du courant diffusif a été ignorée.

On pourra constater que le modèle des flux est très empirique. En effet, il introduit la notion de chiralité afin d'inclure une description du transport plutôt balistique mais reste à une approximation diffusive pour obtenir les paramètres de volume  $\xi$ ,  $\xi'$ ,  $\xi_a$  et  $g^\pm$ . De plus, la recette d'identification de ces paramètres n'a rien d'universelle et ne fonctionne plus dès lors qu'on adopte les équations issues du modèle collisionnel plutôt que celle provenant d'une approche diffusive ou que l'on tient compte des phénomènes d'absorption<sup>7</sup>. Ainsi, si ce modèle permet de mêler en partie des notions liées aux régimes balistique et diffusif, il ne constitue pas un modèle de transport suffisamment robuste étant donné la non universalité des recettes à appliquer ainsi que la forme empirique 5.83 des courants chiraux. Nous allons combler cela en montrant que le modèle des flux ne constitue qu'un cas limite du modèle collisionnel.

### 5.3.2 Méthode des flux et équation de Boltzmann

En 1931 ([253]), il a été montré que l'équation de Boltzmann pouvait faire apparaître des équations similaires à celles de la méthode des flux. L'avantage de cette procédure est qu'elle fournit un moyen plus rigoureux de construction du modèle des flux. Grâce à l'utilisation des polynômes de Legendre décalés, nous avons pu améliorer la conversion de l'équation de Boltzmann en équations des flux ce que nous montrons maintenant.

Pour transformer l'équation de Boltzmann, nous introduisons la notion de diffusivité chirale. Pour chaque chiralité, le courant global associé s'écrit :

$$J^\pm = \pm v \frac{n^\pm}{2} + J_d^\pm \quad (5.93)$$

et correspond à la somme du courant balistique  $\pm v \frac{n^\pm}{2}$  et de la contribution diffusive  $J_d^\pm$ . On définit alors la diffusivité chirale,  $D^\pm(x)$ , comme étant le rapport de la composante diffusive sur la contribution balistique :

$$D^\pm(x) = \pm \frac{2J_d^\pm(x)}{vn^\pm(x)} \quad (5.94)$$

7. pour le transport lumineux, cette méthode d'identification conduit à des coefficients de rétrodiffusion dépendant du coefficient d'absorption  $\mu_a$  ce qui est contradictoire avec leur définition.

Cette définition est à rapprocher de la définition ?? de la balisticité introduite lors de l'étude du cross-over balistique-diffusif. Grâce à cette quantité, les courants chiraux peuvent alors s'écrire :

$$J^\pm(x) = \pm \frac{v}{2} (1 + D^\pm(x)) n^\pm(x) \quad (5.95)$$

Notons qu'on a utilisé des notations applicables pour le transport électrique et photonique.

Avec cette notion, la transformation de l'équation de Boltzmann devient aisée. Pour cela, considérons les équations de transfert radiative chirale 5.17 que nous recopions ici :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial L^\pm}{\partial x} = -(\mu_d + \mu_a) L^\pm + \frac{\mu_d}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [L^+(x, \theta') + L^-(x, \theta')] \quad (5.96)$$

A partir des luminances, les grandeurs macroscopiques chirales sont alors données par :

$$J^\pm = \pm 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta L^\pm \quad u^\pm = \frac{2\pi}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta L^\pm \quad (5.97)$$

En intégrant formellement les deux équations de transfert radiatives, on obtient la dérivée des courants chiraux en fonction des densités d'énergie :

$$\frac{\partial J^\pm}{\partial x} = -\left(\frac{\mu_d}{2} + \mu_a\right) cu^\pm + \frac{\mu_d}{2} cu^\mp \quad (5.98)$$

Pour faire apparaître des équations de flux, il suffit alors d'utiliser les expressions 5.95 des courants chiraux afin de remplacer les densités d'énergie par les courants chiraux. On obtient alors les équations de transport :

$$\frac{\partial J^\pm}{\partial x} = \mp \frac{(\mu_d + 2\mu_a)}{(1 + D^\pm(x))} J^\pm(x) \mp \frac{\mu_d}{(1 + D^\mp(x))} J^\mp(x) \quad (5.99)$$

qui ont la structure des relations 5.81 et 5.82 de la méthode des flux. En effectuant le même travail pour le transport électrique, on obtient alors les équations équivalentes :

$$\frac{\partial J^\pm}{\partial x} \pm \frac{3\sigma_d}{4\ell} \frac{\partial V}{\partial x} = \mp \frac{1}{\ell} \left[ \frac{J^+(x)}{(1 + D^+(x))} + \frac{J^-(x)}{(1 + D^-(x))} \right] \quad (5.100)$$

Quel que soit le type de transport, nous avons donc obtenu des équations de flux pour lesquels les coefficients de rétrodiffusion et d'absorption dépendent de la position par l'intermédiaire des diffusivités. Ainsi, ces équations sont donc incomplètes dans la mesure où des relations supplémentaires sont nécessaires pour calculer les diffusivités. On peut alors développer un modèle simplifié en choisissant certaines approximations pour la diffusivité. Un choix naturel consiste alors à imposer :

$$D^\pm(x) = \text{constante} \quad (5.101)$$

puisqu'il conduit directement à des équations autonomes pour les courants chiraux et assurent que le courant est simplement proportionnel à la densité. On

retrouve ainsi les hypothèses de la méthode des flux.

Nous voyons ainsi que le modèle des flux constitue un cas limite du modèle collisionnel pour lequel la diffusivité est choisie constante. Ce résultat est assez naturel dans la mesure où nous avons montré que les équations issues de la méthode des flux correspondaient à celles du modèle collisionnel dans lesquelles la contribution du courant diffusif était ignorée. De plus, la description des collisions en terme de rétrodiffusion est une vision unidimensionnelle du transport puisque dans ce cas, des collisions élastiques ne font que renverser la vitesse, il n'y a plus de structure angulaire de la fonction de distribution et la composante diffusive du courant disparaît nécessairement. Au final, on peut voir le modèle collisionnel comme un modèle de flux dans un espace tridimensionnel.

## 5.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons appliqué la notion de chiralité au transport de la lumière dans un milieu diffusant. Grâce à cela, nous avons revisité, d'une part le problème de Milne ce qui nous a permis de montrer les avantages des chiralités et d'autre part la méthode des flux en fournissant une méthode rigoureuse de construction. Il est clair que les conséquences des équations de transport chirales photoniques restent à explorer en espérant qu'elles contribuent à une meilleure compréhension de la propagation des ondes dans les milieux désordonnés. L'objectif essentiel de ce chapitre étant de montrer les similitudes entre le transport électrique et lumineux.

## Chapitre 6

# Transport dans les structures CIP

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Introduction au transport CIP . . . . .</b>	<b>116</b>
<b>6.2</b>	<b>Le modèle collisionnel pour le transport CIP . . .</b>	<b>121</b>
<b>6.3</b>	<b>Les apports du modèle collisionnel . . . . .</b>	<b>134</b>
<b>6.4</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>146</b>

---

Dans ce chapitre, nous quittons les structures CPP pour s'intéresser au transport électrique dans les structures CIP. Nous allons montrer comment les idées du modèle collisionnel peuvent être adaptées pour l'étude de telle structure unifiant ainsi les structures CPP et CIP sous un même formalisme grâce à la méthode de projection sur les polynômes orthogonaux. En particulier, nous verrons que le modèle le plus utilisé pour ce genre de structure, le modèle de Fuchs-Sondheimer ([148]), n'est qu'un limite du modèle collisionnel.

La physique liée au transport CIP étant moins riche que celle du transport CPP, nous avons regroupé au sein de ce chapitre l'essentiel du travail pour ces structures. Nous commençons par introduire les caractéristiques du transport CIP ainsi que le modèle de Fuchs-Sondheimer couramment utilisé. Nous passons ensuite à l'adaptation du modèle collisionnel aux structures CIP en s'intéressant au transport de volume et d'interface. La polarisation en spin est également abordée. Nous terminons enfin par l'étude des conséquences du modèle collisionnel pour le transport CIP et essayons de mettre en parallèle les structures CIP et CPP.

## 6.1 Introduction au transport CIP

### 6.1.1 La problématique

Dans ce chapitre, on souhaite toujours comprendre les propriétés de transport électrique d'un assemblage (voir la figure 6.1) de différents matériaux (normal ou magnétique) de résistivité de volume  $\rho$  différente parcouru par un courant continu. A la différence des structures CPP, la configuration CIP oblige le courant à circuler parallèlement aux bords de chaque couche. Pour ces systèmes,

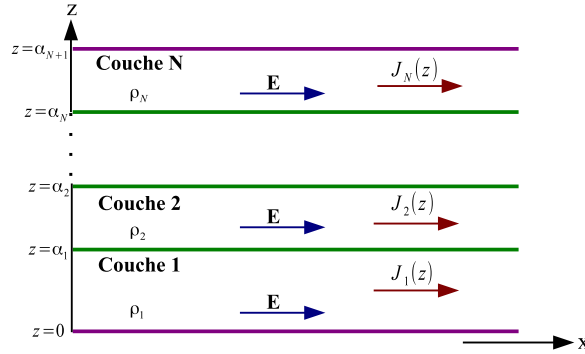


FIGURE 6.1 – Exemple d’un multicouche CIP. Chaque matériau possède une épaisseur ( $\Delta_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$ ) et une résistivité de volume ( $\rho_i$ ) différentes. Dans chaque couche, la densité de courant de charge  $J(z)$  circule parallèlement aux interfaces et les grandeurs physiques ne dépendent que de la coordonnée transverse  $z$ . Le champ électrique  $E$  est également orienté suivant  $x$ .

on fait l’hypothèse d’un transport unidimensionnel ne dépendant que de la variable d’espace  $z$  et les couches sont supposées infiniment épaisses dans les deux autres directions, en particulier la direction  $x$  sens de propagation du courant. On s’intéresse au régime stationnaire (courant continu).

Pour les structures CPP, les grandeurs macroscopiques ne dépendent que de la coordonnée ( $x$ ) correspondant au sens de propagation du courant, celles d’une structure CIP ne sont fonction que de la coordonnée transverse  $z$ . En particulier, les courants étant parallèles aux interfaces, aucun flux macroscopique ne les traverse (figure 6.1) et l’équation de continuité est automatiquement satisfaite puisque le courant ne dépend que de  $z$  :

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial J_x(z)}{\partial x} = 0 \quad (6.1)$$

Le courant n’est donc plus une quantité continue à l’interface.

D’autre part, il est couramment admis (et nous le démontrons dans la suite) que le transport CIP ne s’accompagne pas de l’apparition d’une accumulation de charge. Autrement dit, le transport est dans un régime incompressible et la densité électronique reste identique à celle d’équilibre. Par conséquent, le champ électrique est uniforme dans chacune des couches et orienté suivant la direction  $x$  (figure 6.1). Il n’est donc plus nécessaire de tenir compte de l’équation de Poisson pour les structures CIP. Ce champ électrique est alors engendré par une différence de potentiel électrique appliquée à l’infini amont et aval suivant la direction  $x$ .

On constate donc qu’en géométrie CIP, le champ électrique est indépendant de la position alors que le courant de charge en dépend. Ainsi, la caractérisation du transport ne se fait plus à l’aide de la résistivité mais de la conductivité qui

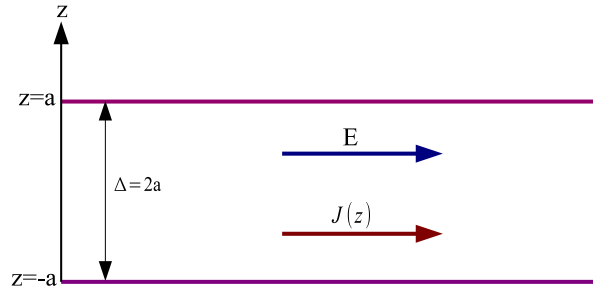


FIGURE 6.2 – Schéma d'une monocouche. Elle est constituée d'un unique matériau. Les bords sont situés en  $z = \pm a$ . L'épaisseur de la couche sera notée  $\Delta = 2a$ .

est une quantité locale :

$$J_x(z) = \int dz' \sigma(z, z') E \Rightarrow J_x(z) = \sigma(z) E \quad (6.2)$$

Ainsi, pour étudier le transport en configuration CIP, il suffit donc de déterminer le profil de courant  $J_x(z)$  dans chacune des couches. Un système simple pour présenter les résultats est celui de la monocouche de la figure 6.2 constitué d'un unique matériau. Lorsqu'on parle d'épaisseur d'une couche, il s'agit maintenant de l'épaisseur suivant la direction  $z$ , de plus sachant que le courant se dirige suivant  $x$ , on écrit simplement le courant  $J(z)$  et non plus  $J_x(z)$ .

Comme pour le transport CPP, on suppose que l'état d'équilibre est décrit dans chaque couche par la fonction de distribution de Fermi-Dirac à température nulle :

$$f_0 = \Theta(\epsilon - \epsilon_f) \quad (6.3)$$

et donc par incompressibilité du transport CIP, la densité électronique est constamment égale à celle d'équilibre :

$$n_0 = \frac{8\pi m^3 v_f^3}{3h^3} \quad (6.4)$$

### 6.1.2 Le modèle de Fuchs-Sondheimer

Le transport dans les structures CIP a déjà fait l'objet de beaucoup d'études avec ou sans polarisation en spin du transport. On peut distinguer deux types d'approches : des approches semi-classiques ([148] à [160]) basées sur le modèle de Fuchs-Sondheimer que nous présentons dans ce paragraphe et des approches quantiques ([162] à [177]) utilisant la formule de conductivité de Kubo-Greenwood ([245], [247]) et nécessitant un calcul relativement lourd de fonction de Green. Les deux types d'approche donnent qualitativement les mêmes résultats. Le modèle de Fuchs-Sondheimer constitue alors l'approche la plus simple pour l'étude du transport dans de telle structure.



Le modèle de Fuchs-Sondheimer ([148] et [149] à [160]) est un modèle semi-classique reposant sur l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation qui compte tenu de la géométrie s'écrit sous la forme :

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{eE}{m} \frac{\partial f}{\partial v_x} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (6.5)$$

Pour pouvoir décrire les effets d'interface, ce modèle introduit déjà la notion de chiralité en distinguant les électrons se propageant vers le haut ( $v_z > 0$ ) de ceux se dirigeant vers le bas ( $v_z < 0$ ). Ainsi, la fonction de distribution est scindée en deux composantes,  $f^+$  pour les montants et  $f^-$  pour les descendants et l'équation de Boltzmann précédente se divise alors sous la forme :

$$\pm v_z \frac{\partial f^\pm}{\partial z} - \frac{eE}{m} \frac{\partial f^\pm}{\partial v_x} = -\frac{f^\pm - f_0}{\tau} \quad (6.6)$$

où  $f_0$  est la fonction de distribution d'équilibre. A ces équations de volumes sont associées des conditions de collisions d'interface de type spéculaires (voir la figure 6.3) :

$$f_i^+(\alpha_i, \mathbf{v}) = R_i f_i^-(\alpha_i, \mathbf{v}) + T_i f_{i-1}^+(\alpha_i, \mathbf{v}) + (1 - R_i - T_i) f_0 \quad (6.7)$$

$$f_{i-1}^-(\alpha_i, \mathbf{v}) = R_i f_{i-1}^+(\alpha_i, \mathbf{v}) + T_i f_i^-(\alpha_i, \mathbf{v}) + (1 - R_i - T_i) f_0 \quad (6.8)$$

Un électron arrivant à une interface a donc une probabilité  $R$  d'être réfléchi dans un état hors-équilibre dans sa couche de provenance, une probabilité  $T$  d'être transmis dans un état hors-équilibre à la couche suivante et une probabilité  $1 - R - T$  de retourner à l'état d'équilibre. Notons que ces coefficients de transmission et réflexion ne satisfont pas la règle habituelle  $R + T = 1$ . Au niveau des bords périphériques ( $z = 0$  et  $z = \alpha_{N+1}$  sur la figure 6.1) le coefficient de transmission est nécessairement nul.

Ce modèle est alors bien posé puisqu'il permet de déterminer complètement les fonctions de distribution pour chacune des couches du multicouche donnant ainsi accès au profil de courant défini par la moyenne :

$$J(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int dv v_x (f^+(z, \mathbf{v}) + f^-(z, \mathbf{v})) \quad (6.9)$$

La conductivité s'obtient alors en linéarisant ce modèle autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique.

### 6.1.3 Nécessité d'aller plus loin

Si le modèle de Fuchs-Sondheimer semble relativement simple et bien posé, il fournit des expressions des fonctions de distribution relativement lourdes ne permettant pas le calcul analytique du profil de courant 6.9 et ce même pour la structure monocouche très simple de la figure 6.2. En effet, on peut montrer (voir par exemple [148]), en paramétrisant la vitesse sous la forme

$$v_z = v \cos \theta \quad v_x = v \sin \theta \cos \varphi \quad (6.10)$$

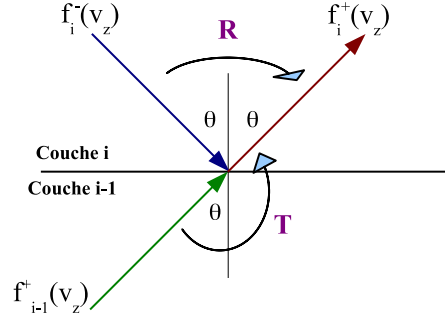


FIGURE 6.3 – Au niveau d’un bord, les électrons sont réfléchis ou transmis spéculairement à des taux spécifiés par les coefficients de transmission  $T$  et de réflexion  $R$ . Les processus de transmission conserve la coordonnée  $v_z$  de la vitesse alors que la réflexion lui change son signe. Pour ces deux processus, l’angle d’incidence  $\theta$  est égal à l’angle de sortie.

que le profil de conductivité correspondant à la monocouche s’écrit sous la forme :

$$\frac{\sigma(z)}{\sigma_d} = 1 - \frac{3(1-R)}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \frac{\left( e^{-\frac{(z+a)}{\ell \cos \theta}} + e^{\frac{(z-a)}{\ell \cos \theta}} \right)}{1 - R e^{-\frac{2a}{\ell \cos \theta}}} \quad (6.11)$$

où  $R$  désigne le coefficient de réflexion, qu’on a supposé identique aux deux bords de la couche,  $\ell = v_f \tau$  est le libre parcours moyen et  $\sigma_d$  est la conductivité de Drude de la couche :

$$\sigma_d = \frac{1}{\rho_d} = \frac{e^2 n_0 \tau}{m} \quad (6.12)$$

Le calcul de cette intégrale ne fait pas apparaître de fonction connue et seul le cas  $R = 0$  peut être traité jusqu’au bout en faisant intervenir la fonction exponentielle intégrale (voir l’annexe D.3 pour la définition de cette fonction). Dans la pratique, le recours à des méthodes numériques s’avèrent nécessaire pour calculer d’une part les fonctions de distribution et d’autre part l’intégrale angulaire sur l’espace des vitesses. Ainsi, le modèle de Fuchs-Sondheimer ne permet pas de prédire de forme bien précise pour le profil de conductivité qui change suivant le nombre de couche considéré contrairement au structure CPP où nous avons établi une forme universelle du profil de résistivité (expression 2.106) quelque soit le nombre de couches de la structure.

D’autre part, les conditions de bords du modèle de Fuchs-Sondheimer sont de types spéculaires et ne tiennent pas compte de la véritable nature diffusive (intégrale de collision) des collisions d’interface. De plus, il introduit des coefficients de transmission et de réflexion ne satisfaisant pas la relation habituelle  $R + T = 1$  (nécessairement vérifiée pour une structure CPP), chose qui mérite des éclaircissements.

les différents points qui viennent d’être mentionnés montrent la nécessité d’aller au delà du modèle de Fuchs-Sondheimer. Un dernier point qui montre

encore plus le besoin de corriger ce modèle est la différence de traitement existant entre les structures CIP et CPP. En effet, pour le transport CPP, il est toujours possible de se ramener à un modèle de transport macroscopique faisant directement intervenir les grandeurs moyennes que l'on cherche à déterminer. Pour les structures CIP les choses sont toutes autres puisque avec le modèle de Fuchs-Sondheimer (mais aussi les approches quantiques), on reste en permanence à l'échelle microscopique en calculant des fonctions de distribution qui ne permettent pas d'anticiper la structure des grandeurs macroscopiques d'intérêt. Nous voyons cependant que l'introduction des chiralités pour le transport CPP permet de faire un premier pas vers l'unification de ces deux types de structures puisqu'en configuration CIP, la notion de chiralité émerge naturellement et est indispensable pour décrire les effets d'interfaces. Dans ce chapitre, nous irons plus loin dans cette unification en montrant comment les idées du modèle collisionnel s'adapte aux structures CIP et permet de combler toutes les lacunes mentionnées dans ce paragraphe. Nous allons montrer qu'en fine, le modèle se ramène à des calculs portant directement sur les grandeurs macroscopiques. Mais il faut comprendre que le modèle macroscopique émergent est assez différent de celui rencontré pour les structures CPP dans la mesure où le nombre de grandeurs macroscopiques pertinentes pour le transport CIP est très réduit puisqu'il se résume à une seule grandeur : le profil de conductivité  $\sigma(z)$ .

## 6.2 Le modèle collisionnel pour le transport CIP

Dans ce paragraphe, nous présentons l'extension du modèle collisionnel à l'étude du transport dans les structures CIP. Nous commençons par exposer l'équation de Boltzmann et sa chiralisation. A partir de celle-ci, nous démontrons ensuite l'absence d'accumulation de charge en transport CIP. Dans la troisième partie, nous établissons une expression universelle de la conductivité applicable en toute circonstance pour une couche quelconque d'un multicouche. Nous présentons ensuite les nouvelles conditions d'interface et poursuivons par la mise oeuvre pratique de ce nouveau modèle. Nous terminons enfin par l'extension en spin de ce formalisme.

### 6.2.1 Au delà du temps de relaxation

Pour l'étude du transport CPP, la nature intégrale du terme de collision de l'équation de Boltzmann est nécessaire pour garantir la conservation du courant. Précédemment, nous avons vu que le modèle de Fuchs-Sondheimer faisait intervenir l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation qui est inapplicable pour les structures CPP. Ainsi, dans un souci d'unification des deux types de structures, il est donc nécessaire de choisir une équation de Boltzmann de volume commune pour CPP et CIP à savoir :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)) \quad (6.13)$$

où  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  est l'angle solide relatif à la variable vitesse.

Etant donné la géométrie, la fonction de distribution ne dépend que de la variable d'espace  $z$  et évolue sous l'action d'un champ électrique dirigé suivant l'axe des  $x$ . La fonction de distribution est indépendante du temps. Ainsi, l'équation de Boltzmann se simplifie sous la forme :

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} - eE v_x \frac{\partial f}{\partial \epsilon} = \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f(z, \mathbf{v}') - f(z, \mathbf{v})) \quad (6.14)$$

dans laquelle on a introduit l'énergie cinétique  $\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$  et  $v_x$  et  $v_z$  désignent respectivement les composantes suivant  $x$  et  $z$  du vecteur vitesse.

Dans les structures CIP, les effets d'interface sont liés à la nature montante ou descendante des électrons. Ainsi, comme dans le modèle de Fuchs-Sondheimer, la chiralisation du transport s'effectue maintenant suivant le signe de la composante  $v_z$  de la vitesse. L'équation de Boltzmann 6.14 se scinde alors en deux équations chirales :

$$\pm v_z \frac{\partial f^\pm}{\partial z} - eE v_x \frac{\partial f^\pm}{\partial \epsilon} = -\frac{f^\pm}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f^+(z, \mathbf{v}') + f^-(z, \mathbf{v}')) \quad (6.15)$$

Les composantes  $v_x$  et  $v_z$  de la vitesse seront paramétrées sous la forme :

$$v_x = v \sin \theta \cos \varphi \quad v_z = v \cos \theta \quad (6.16)$$

où l'angle  $\varphi$  appartient à l'intervalle  $[0, 2\pi]$  et l'angle  $\theta$  parcourt  $[0, \frac{\pi}{2}]$  puisque  $v_z$  est une quantité toujours positive.  $v$  désigne la norme de la vitesse.

Cherchant à calculer des profils de conductivité, on linéarise donc les fonctions de distribution autour de l'état d'équilibre :

$$f^\pm(z, \mathbf{v}) = f_0(\epsilon) + g^\pm(z, \mathbf{v}) \quad (6.17)$$

et la linéarisation des équations de Boltzmann 6.15 par rapport au champ électrique conduit alors à :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial g^\pm}{\partial z} - eE \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{g^\pm}{\ell} + \frac{1}{4\pi\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' (g^+(\theta', \varphi') + g^-(\theta', \varphi')) \quad (6.18)$$

où  $\ell = v\tau$  est le libre parcours moyen. Cette dernière équation est à la base de tous les développements de ce chapitre. En particulier, à partir des parties hors-équilibre  $g^\pm$  des fonctions de distribution, le profil de courant est déterminé par la relation habituelle :

$$J^\pm(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} v_x g^\pm(z, \mathbf{v}) \quad J(z) = J^+(z) + J^-(z) \quad (6.19)$$

Il faut noter que les exposants ( $\pm$ ) de ces courants chiraux sont associés aux mouvement microscopique montant-descendant des électrons alors que les courants eux mêmes sont associés à des flux macroscopiques dans la direction  $x$ .

Pour terminer que le profil d'accumulation, qu'on utilisera peu, est fourni par l'intégrale :

$$n(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} (g^+(z, \mathbf{v}) + g^-(z, \mathbf{v})) \quad (6.20)$$

Remarque : dans la suite, on écrit l'intégrale sur la vitesse intervenant dans le calcul des valeurs moyennes sous la forme :

$$2 \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \quad (6.21)$$

où  $\epsilon$  désigne la variable énergie et  $\rho(\epsilon) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon}$  est la densité d'état.

### 6.2.2 Transport CIP et accumulation

Nous avons établi l'équation de Boltzmann (équation 6.18) relatif au transport CIP. Cette équation ressemble à celle obtenue pour CPP mais une différence essentielle est qu'en CIP le terme source du champ électrique dépend des deux angles  $\theta$  et  $\varphi$ . Afin de se ramener à une équation de Boltzmann dépendante du seul angle  $\theta$  (qui joue le même rôle qu'en CPP), il est nécessaire d'éliminer l'angle  $\varphi$ . Nous devons alors introduire la famille des polynômes orthogonaux de Tchebychev.

Les polynômes de Tchebychev de première espèce<sup>1</sup> sont orthogonaux sur  $[-1, 1]$  pour le poids  $W(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$  :

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq k \\ \frac{\pi}{2} & \text{si } n = k \neq 0 \\ \pi & \text{si } n = k = 0 \end{cases} \quad (6.22)$$

et sont construits par la relation :

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.23)$$

Ils vérifient la relation de récurrence :

$$T_{n+1} = 2T_1 T_n - T_{n-1} \quad T_0(x) = 1 \quad T_1(x) = x \quad (6.24)$$

Le changement de variable  $x = \cos \alpha$  rend alors ces polynômes orthogonaux sur  $[0, \pi]$  pour le poids 1 :

$$\int_0^\pi d\alpha T_n(\cos \alpha) T_k(\cos \alpha) = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq k \\ \frac{\pi}{2} & \text{si } n = k \neq 0 \\ \pi & \text{si } n = k = 0 \end{cases} \quad (6.25)$$

Ces propriétés suffisent à comprendre les développements qui suivent.

<sup>1</sup>. Ces polynômes sont dit de première espèce car il existe ceux de deuxième espèce qu'on ne présentera pas ici.

Pour éliminer l'angle  $\varphi$ , on décompose alors les parties hors-équilibre des fonctions de distribution ( $g^\pm$ ) sur la base des polynômes de Tchebychev pour l'angle  $\varphi$  :

$$g^\pm(z, v, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm(z, v, \theta) T_n\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) \quad (6.26)$$

où les fonctions  $g_n^\pm(z, v, \theta)$  sont les composantes sur les polynômes de Tchebychev.

En injectant ce développement dans l'équation de Boltzmann 6.18, la projection sur les polynômes de Tchebychev (voir annexe D.1) conduit alors à un ensemble d'équations portant directement sur les composantes :

– **Composante d'ordre zéro** ( $g_0^\pm(z, v, \theta)$ ) :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_0^+ = -\frac{g_0^+}{\ell} + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \\ -\cos \theta \partial_z g_0^- = -\frac{g_0^-}{\ell} + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \end{cases} \quad (6.27)$$

– **Composante d'ordre deux** ( $g_2^\pm(z, v, \theta)$ ) :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_2^+ + \frac{g_2^+}{\ell} = eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \\ -\cos \theta \partial_z g_2^- + \frac{g_2^-}{\ell} = eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \end{cases} \quad (6.28)$$

– **Composante d'ordre m** ( $g_m^\pm(z, v, \theta)$ ) avec  $m = 1$  ou  $m \geq 3$  :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_m^+ + \frac{g_m^+}{\ell} = 0 \\ -\cos \theta \partial_z g_m^- + \frac{g_m^-}{\ell} = 0 \end{cases} \quad (6.29)$$

On remarque que les équations obtenues sont autonomes pour chaque composante dans le sens où les fonctions d'ordre m ne sont couplées qu'entre elles. En particulier, on constate que seules les équations d'ordre zéro font intervenir une intégrale de collision, propriété caractéristique d'un taux de collision isotrope. On est donc capable de résoudre exactement les équations de Boltzmann portant sur les composantes d'ordre  $m \geq 1$  puisque les équations 6.28 et 6.29 sont des équations différentielles ordinaires. Seul le calcul des composantes  $g_0^\pm$  nécessiterait un développement supplémentaire sur les polynômes de Legendre décalés. Cependant, dans la pratique, nous n'avons pas besoin de toutes les composantes.

En effet, en utilisant les définitions 6.19 et 6.20, on peut relier les grandeurs macroscopiques directement à certaines composantes du développement sur les polynômes de Tchebychev :

$$J(z) = -\frac{e}{4} \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) v(\epsilon) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^2 \theta (g_2^+(z, \theta) + g_2^-(z, \theta)) \quad (6.30)$$

$$n(z) = -\frac{e}{2} \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta (g_0^+(z, \theta) + g_0^-(z, \theta)) \quad (6.31)$$

On constate en particulier que le profil de courant est relié aux composantes d'ordre deux et le profil d'accumulation à celles d'ordre zéro.

Ainsi, **l'étude du transport dans les structures CIP nécessite uniquement la connaissance des composantes d'ordre deux des parties hors-équilibre des fonctions de distribution** que l'on sait facilement déterminer. D'autre part, en observant les équations 6.27, 6.28 et 6.29, on constate que seules les composantes d'ordre deux sont couplées au champ électrique perturbateur. Etant donné que l'état hors-équilibre étudié est engendré par le champ électrique, il n'y a donc pas de raison d'avoir des composantes  $g_0^\pm$  et  $g_m^\pm$  ( $m = 1$  ou  $m \geq 3$ ) non nulles puisqu'elles ne sont pas couplées au champ électrique. On en arrive donc à la conclusion **qu'en structure CIP, il y a absence d'accumulation de charge, on a donc un régime de transport incompressible**. On démontre ainsi une chose couramment admise directement à partir de l'équation de Boltzmann et qui apparaît naturellement par projection sur la base de polynômes adéquate. De plus, nous voyons que courant et accumulation sont des grandeurs complètement découplées contrairement au transport CPP. Le courant ne peut donc dériver des gradients de l'accumulation en transport CIP.

### 6.2.3 Profil universel de conductivité

L'étude du transport dans les structures CIP nécessite donc la connaissance des composantes d'ordre deux du développement 6.26 de la fonction de distribution sur les polynômes de Tchebychev. En particulier, les équations 6.28 montrent que celles-ci vérifient des équations différentielles ordinaires du premier ordre dont les solutions s'écrivent, quelque soit la couche du multicouche, sous la forme :

$$g_{2i}^+(z, \theta) = eE\ell_i \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^+(\theta) e^{-\frac{(z-\alpha_i)}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (6.32)$$

$$g_{2i}^-(z, \theta) = eE\ell_i \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^-(\theta) e^{\frac{(z-\alpha_{i+1})}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (6.33)$$

Dans ces expressions, l'indice  $i$  désigne la  $i$ ème couche de la structure et  $\alpha_i$  et  $\alpha_{i+1}$  désignent respectivement les coordonnées de ses bords inférieur et supérieur (voir la figure 6.1). Les fonctions  $B^\pm$  ne sont fonction que de l'angle  $\theta$  (à cause de la projection sur les polynômes de Tchebychev) et correspondent aux constantes d'intégration des équations 6.28.

A partir de ces expressions des fonctions de distribution, on pourrait penser que le calcul des profils de courant 6.30 est impossible à ce stade puisqu'il reste à déterminer les deux fonctions  $B^\pm$  dépendante de l'angle  $\theta$ . En fait, il n'en est rien puisque grâce à la méthode projective, on peut faire émerger une expression universelle, c'est à dire applicable pour tout multicouche, des profils de conductivité. En effet, étant fonction de  $\theta$ , les fonctions  $B^\pm$  sont décomposables sur la base des polynômes de Legendre décalés :

$$B^\pm(\theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) B_n^\pm \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (6.34)$$

faisant ainsi apparaître une dépendance explicite pour l'angle  $\theta$ .

Ainsi, en injectant les expressions des fonctions de distribution 6.32 et 6.33 et les développements 6.34 des fonctions  $B^\pm$  dans l'intégrale 6.30, on peut alors en déduire l'expression des profils de conductivité  $\sigma_i^\pm(z)$  par chiralité pour chaque couche  $i$  :

$$J_i^\pm(z) = \sigma_i^\pm(z)E \quad (6.35)$$

avec

$$\sigma_i^+(z) = \frac{\sigma_{di}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) B_{ni}^+ \psi_n \left( \frac{(z - \alpha_i)}{\ell_i} \right) \right] \quad (6.36)$$

$$\sigma_i^-(z) = \frac{\sigma_{di}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) B_{ni}^- \psi_n \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\ell_i} \right) \right] \quad (6.37)$$

$$\psi_n(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \bar{P}_n(\cos \theta) e^{-\frac{x}{\cos \theta}} \quad (6.38)$$

où  $\sigma_{di}$  désigne la conductivité de Drude de la couche  $i$ . Dans ces expressions, les fonctions  $\psi$  ne dépendent que de la variable  $z$  et s'écrivent comme des combinaisons d'exponentielle intégrale<sup>2</sup> (annexe D.3). En particulier, les trois premières fonctions s'écrivent :

$$\psi_0(x) = E_2(x) - E_4(x) \quad (6.39)$$

$$\psi_1(x) = 2(E_3(x) - E_5(x)) - (E_2(x) - E_4(x)) \quad (6.40)$$

$$\psi_2(x) = 6(E_4(x) - E_6(x)) - 6(E_3(x) - E_5(x)) + (E_2(x) - E_4(x)) \quad (6.41)$$

et la valeur en zéro est donnée par la relation :

$$\psi_n(0) = \frac{2}{3} \delta_{n,0} - \frac{1}{6} \delta_{n,1} - \frac{1}{30} \delta_{n,2} \quad (6.42)$$

A partir de ces profils de conductivité, on peut alors en déduire l'expression analytique de la conductivité intégrée de la couche  $i$  :

$$\sigma_i = \int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} dz (\sigma_i^+(z) + \sigma_i^-(z)) \quad (6.43)$$

qui prend alors la forme adimensionnée :

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_{di} \Delta_i} = 1 - \frac{3\kappa_i}{4} \left[ \frac{C_{0i}}{4} + \frac{C_{1i}}{20} - \frac{C_{2i}}{4} - \frac{C_{3i}}{20} - \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(2n+1)}{2} C_{ni} \left( \psi_n \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) + \frac{(n+1)}{(2n+1)} \psi_{n+1} \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) + \frac{n}{(2n+1)} \psi_{n-1} \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) \right) \right] \quad (6.44)$$

$$C_{ni} = B_{ni}^+ + B_{ni}^- \quad (6.45)$$

où  $\Delta_i = \alpha_{i+1} - \alpha_i$  est l'épaisseur de la couche et  $\kappa_i = \frac{\ell_i}{\Delta_i}$  son nombre de

2. en effectuant le changement de variable  $t = \frac{1}{\cos \theta}$ .



Knudsen. On constate en particulier qu'elle fait intervenir les mêmes fonctions  $\psi_n$  intervenant dans les profils de conductivité.

Dans ce paragraphe, nous avons donc établi les expressions des profils de conductivité et de conductivité intégrée pour une couche quelconque d'un multicouche. Ce résultat, conséquence de la méthode projective, constitue une avancée puisqu'il n'existait aucune forme de profil connue dans la littérature. Il est clair qu'à ce stade, les sommations infinies intervenant dans ces formules doivent être simplifiées pour rendre les expressions utilisables. Nous montrons, une fois les conditions d'interface présentées, comment utiliser en pratique les expressions de ces profils.

Notons pour terminer que les profils obtenus constituent une approche macroscopique du transport CIP puisque la variable vitesse à complètement disparue. A la différence du transport CPP, aucune équation de transport pour les grandeurs macroscopiques n'a été établie dans la mesure où l'expression exacte de la fonction de distribution est connue. Nous verrons dans la suite qu'on peut toutefois dériver des équations de transport pour les structures CIP fournissant nécessairement une solution approchée des expressions présentées dans ce paragraphe.

Remarque : Etant donnée que les parties hors-équilibre des fonctions de distribution n'ont qu'une composante d'ordre deux non nulle sur les polynômes de Tchebychev, le développement 6.26 s'écrit donc :

$$g_i^+(z, \theta) = eE\ell_i \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^+(\theta) e^{-\frac{(z-\alpha_i)}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (6.46)$$

$$g_i^-(z, \theta) = eE\ell_i \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^-(\theta) e^{\frac{(z-\alpha_{i+1})}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (6.47)$$

puisque  $T_2(\cos \frac{\varphi}{2}) = \cos \varphi$ . Ceci fournit donc l'expression exacte des parties hors-équilibre des fonctions de distribution.

### 6.2.4 Les conditions de bords et d'interfaces

Pour que les profils de conductivité 6.36 et 6.37 soient univoquement déterminés, il reste à obtenir les expressions des coefficients  $B_n^\pm$ . Ces quantités sont des constantes déterminées par les conditions d'interface que l'on présente maintenant.

Comme pour le transport CPP, les effets d'interfaces vont être décrit pas des intégrales de collision exprimant toujours les fonctions de distribution des électrons quittant l'interface en fonction de celles arrivant à celle-ci. Ces équations de collisions d'interface prennent donc la forme :

$$f_t^+ = 2 \left( \frac{m}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v} \delta(\epsilon - \epsilon') [W_{tt}(\Omega, \Omega') f_t^-(\mathbf{v}') + W_{tb}(\Omega, \Omega') f_b^+(\mathbf{v}')] \quad (6.48)$$

$$f_b^- = 2 \left( \frac{m}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v} \delta(\epsilon - \epsilon') [W_{bb}(\Omega, \Omega') f_b^+(\mathbf{v}') + W_{bt}(\Omega, \Omega') f_t^-(\mathbf{v}')] \quad (6.49)$$

dans lesquelles on a utilisé les conventions d'écriture de la figure 6.4, les indices t et b font respectivement référence aux couches se situant au dessus et en dessous

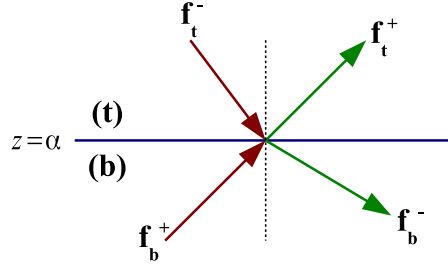


FIGURE 6.4 – Convention retenue pour écrire les conditions d’interface. Les grandeurs physiques caractéristiques du milieu au dessus de l’interface sont indexées par t (top), celles de la couche du dessous par b (bottom). L’interface est positionnée en  $z = \alpha$ . L’interface convertit les électrons arrivant ( $f_t^-$  et  $f_b^+$ ) en électrons sortant ( $f_t^+$  et  $f_b^-$ ) en ne conservant plus nécessairement la composante  $v_z$  de la vitesse.

de l’interface. Dans ces équations, on a posé implicitement  $z = \alpha$  (coordonnée de l’interface) dans les fonctions de distribution. Les taux de collision  $W_{tt}$  et  $W_{bb}$  décrivent des processus de réflexion et  $W_{bt}$ ,  $W_{tb}$  des processus de transmission. La fonction delta en énergie caractérise l’élasticité des collisions et permet en particulier de ramener les intégrales sur la vitesse à une intégrale angulaire :

$$f_t^+ = \int \frac{d\Omega'}{2\pi} [\rho_t^-(\epsilon) W_{tt}(\Omega, \Omega') f_t^-(\Omega') + \rho_b^+(\epsilon) W_{tb}(\Omega, \Omega') f_b^+(\Omega')] \quad (6.50)$$

$$f_b^- = \int \frac{d\Omega'}{2\pi} [\rho_b^+(\epsilon) W_{bb}(\Omega, \Omega') f_b^+(\Omega') + \rho_t^-(\epsilon) W_{bt}(\Omega, \Omega') f_t^-(\Omega')] \quad (6.51)$$

où l’on a introduit les densités d’état par chiralité  $\rho^\pm(\epsilon) = \frac{4\pi\sqrt{2}m^{3/2}}{h^3} \sqrt{\epsilon}$ . Remarquons que ces conditions d’interface sont valables aussi bien pour des interfaces internes entre deux couches adjacentes que pour les bords externes pour lesquels les processus de transmission sont nécessairement nuls.

Jusqu’à maintenant, les équations de collisions sont analogues à celles introduites pour le transport CPP mais il existe une différence de traitement, caractéristique du transport CIP, que nous expliquons maintenant.

Etant donnée que les fonctions de distribution ne sont plus isotropes en  $\varphi$ , les taux de transitions doivent également être décomposés sur la base des polynômes de Tchebychev :

$$\rho(\epsilon) W_{ij}(\Omega, \Omega') = \sum_{n=0}^{+\infty} \overline{W}_{ij}^n(\theta, \theta') T_n\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) T_n\left(\cos \frac{\varphi'}{2}\right) \quad (6.52)$$

où les indices i et j désignent t ou b. La forme diagonale a été retenue dans la mesure où la présence de termes non diagonaux ne ferait que renormaliser des effets déjà contenu dans les coefficients diagonaux (comme pour CPP). Les composantes  $\overline{W}_{ij}^n$  ne sont fonctions que des angles  $\theta$  et  $\theta'$  (et de l’énergie).

Pour le transport CPP, Les taux de transition ont ensuite été contraints par les lois de conservation du nombre de particules entrant et sortant de l'interface ainsi que la conservation du courant. Cependant, pour le transport CIP, ces lois de conservation sont sans effets sur les composantes  $\overline{W}_{ij}^n$  qui vont nous intéresser. En effet, notons que la compatibilité avec l'état d'équilibre impose que la fonction d'équilibre soit invariante sous les collisions d'interface. On est donc conduit à poser la règle de somme :

$$\int \frac{d\Omega'}{2\pi} (\rho_t^-(\epsilon) W_{tt}(\Omega, \Omega') + \rho_b^+(\epsilon) W_{tb}(\Omega, \Omega')) = 1 \quad (6.53)$$

$$\int \frac{d\Omega'}{2\pi} (\rho_b^+(\epsilon) W_{bb}(\Omega, \Omega') + \rho_t^-(\epsilon) W_{bt}(\Omega, \Omega')) = 1 \quad (6.54)$$

Ainsi, en injectant la décomposition 6.17 dans les équations de collisions 6.50 et 6.51 et en utilisant le fait que les parties hors équilibre des fonctions de distribution ne possèdent qu'une unique composante d'ordre deux ( $g_2^\pm$ ) sur les polynômes de Tchebychev, nous voyons que ces équations de collisions deviennent :

$$g_{2t}^+ = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\overline{W}_{tt}^2(\theta, \theta') g_{2t}^-(\theta') + \overline{W}_{tb}^2(\theta, \theta') g_{2b}^+(\theta')] \quad (6.55)$$

$$g_{2b}^- = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\overline{W}_{bb}^2(\theta, \theta') g_{2b}^+(\theta') + \overline{W}_{bt}^2(\theta, \theta') g_{2t}^-(\theta')] \quad (6.56)$$

où les fonctions  $g_2^\pm$  ne dépendent que de l'angle  $\theta$  et sont données par les relations 6.32 et 6.33.

Ces équations ne font donc intervenir que la composante d'ordre deux des fonctions de distribution et nécessitent donc la donnée des composantes d'ordre deux des taux de transitions. Or, imposer la conservation du nombre de particules arrivant et quittant l'interface ainsi que la conservation du courant n'affecte que la composante  $W_{ij}^0$  d'ordre zéro du développement 6.52 puisque les accumulations sont fournies par l'intégrale :

$$n^\pm(z) = n(z) = -\frac{e}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta f^\pm(z, \theta, \varphi, \epsilon) \quad (6.57)$$

qui sélectionne donc la composante d'ordre zéro sur les polynômes de Tchebychev. De plus, seule la composante normale à l'interface du courant devant être conservée, la conservation du courant porte donc sur la composante  $J_z$  donnée par l'intégrale

$$J(z) = -\frac{e}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta v(\epsilon) \cos \theta (f^+(z, \theta, \varphi, \epsilon) - f^-(z, \theta, \varphi, \epsilon)) \quad (6.58)$$

qui ne dépend également que de la composante d'ordre zéro de la fonction de distribution sur les polynômes de Tchebychev. Nous voyons ainsi que la composante d'intérêt des taux de transition est transparente vis-à-vis des différentes lois de conservation macroscopiques. Cette propriété, caractéristique du transport CIP, empêche donc de contraindre les composantes d'ordre deux des taux de transition augmentant ainsi le nombre de paramètres libres pour décrire l'interface. Notons que cette propriété provient également du régime de transport incompressible dans lequel on se trouve puisque n'engendrant pas d'accumulation, la densité d'électrons par couche reste constamment égale à celle d'équilibre

quelque soit la physique de l'interface. La conservation des électrons entrant et sortant de l'interface est donc automatiquement satisfaite. Notons enfin que la condition de compatibilité d'équilibre n'influence également que la composante d'ordre zéro des taux de transition.

N'ayant aucune contrainte à appliquer sur les composantes d'ordre deux des taux de transitions, nous allons supposer pour simplifier que :

$$\frac{\overline{W}_{tt}^2(\theta, \theta')}{2} = \frac{\overline{W}_{bb}^2(\theta, \theta')}{2} = R(\theta, \theta') \quad (6.59)$$

$$\frac{\overline{W}_{tb}^2(\theta, \theta')}{2} = \frac{\overline{W}_{bt}^2(\theta, \theta')}{2} = T(\theta, \theta') \quad (6.60)$$

et les taux de réflexion R et de transmission T seront développés sur la base des polynômes de Legendre décalés sous la forme :

$$R(\theta, \theta') = \sin \theta \sin \theta' \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 R_n(\epsilon) \overline{P}_n(\cos \theta) \overline{P}_n(\cos \theta') \quad (6.61)$$

$$T(\theta, \theta') = \sin \theta \sin \theta' \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 T_n(\epsilon) \overline{P}_n(\cos \theta) \overline{P}_n(\cos \theta') \quad (6.62)$$

dans lesquels le terme  $\sin \theta \sin \theta'$  a été mis en facteur dans la mesure où les composantes d'ordre deux des fonctions de distribution font intervenir un facteur  $\sin \theta$  (voir les expressions 6.32 et 6.33). Notons que ce choix d'écriture est toujours possible et qu'il a pour objectif de simplifier les calculs. Nous voyons que les taux de réflexion et de transmission ne satisfont pas la règle de somme habituelle  $R + T = 1$  pour aucune de leur composante ce qui était déjà le cas pour les coefficients de réflexion et de transmission introduits par le modèle de Fuchs-Sondheimer. Nous comprenons maintenant à travers cette étude que cette propriété découle de l'incompressibilité du transport en structure CIP ou de façon équivalente l'existence pour les fonctions de distribution d'une unique composante d'ordre deux sur les polynômes de Tchebychev.

A partir des conditions d'interface 6.55 et 6.56, on peut alors déterminer un système d'équations algébriques pour les différentes composantes  $B_n^\pm$  des fonctions  $B^\pm$  (relation 6.34). Ces équations, dont la dérivation est présentée dans l'annexe D.2, s'écrivent :

$$B_{tn}^+ = \left[ \left( 1 - \frac{2}{3} (R_0 + \eta T_0) \right) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} (R_1 + \eta T_1) \delta_{n,1} + \frac{1}{6} (R_2 + \eta T_2) \delta_{n,2} \right] \\ + (2n+1) \sum_{j=0}^{+\infty} (2j+1) \left[ R_n \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) B_{tj}^- + \eta T_n \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) B_{bj}^+ \right] \quad (6.63)$$

$$B_{bn}^- = \left[ \left( 1 - \frac{2}{3} \left( R_0 + \frac{T_0}{\eta} \right) \right) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} \left( R_1 + \frac{T_1}{\eta} \right) \delta_{n,1} + \frac{1}{6} \left( R_2 + \frac{T_2}{\eta} \right) \delta_{n,2} \right] \\ + (2n+1) \sum_{j=0}^{+\infty} (2j+1) \left[ R_n \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) B_{bj}^+ + \frac{T_n}{\eta} \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) B_{tj}^- \right] \quad (6.64)$$

$$\psi_{mj}(x) = \psi_{jm}(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_j(\cos \theta) e^{-\frac{x}{\cos \theta}} \quad (6.65)$$

où  $\eta = \frac{\ell_b}{\ell_t}$  est le rapport des libres parcours moyen et  $\kappa = \frac{\ell}{\Delta}$  le nombre de Knudsen. Les fonctions  $\psi_{mj}$  s'écrivent comme des combinaisons d'exponentielle intégrale. Ces équations, appliquées à chaque interface d'un multicouche permettent ainsi la détermination de toutes les constantes  $B_n^\pm$  et donc des profils 6.36, 6.37 et 6.44 des grandeurs macroscopiques.

### 6.2.5 Mise en oeuvre pratique

On aura pu constater que les expressions des profils de conductivité (6.36, 6.37 et 6.44) introduisent une infinité de composantes  $B_n^\pm$  qui nécessite donc la résolution d'un système infini d'équations (6.63 et 6.64). Des simplifications sont donc nécessaire pour rendre ce modèle utilisable en pratique.

Pour le transport CPP, le modèle macroscopique a été obtenu en tronquant à l'ordre minimal les équations obtenues par la projection de l'équation de Boltzmann. Nous allons donc en faire autant pour le transport CIP, en tronquant les sommes intervenant dans les profils de conductivité. Pour déterminer le rang de troncature, il suffit d'observer la décroissance des fonctions  $\psi_n$  intervenant dans les expressions 6.36 et 6.37 des profils de conductivité. La figure 6.5 montre l'évolution des six premières fonctions  $(2n+1)\psi_n$ . On constate alors que toutes ces fonctions tendent vers zéro lorsque  $x$  tend vers l'infini et ce d'autant plus rapidement que l'indice  $n$  augmente. On observe alors que les trois contributions les plus importantes sont fournies par les trois premières fonctions :  $\psi_0$ ,  $\psi_1$  et  $\psi_2$ .

Nous allons donc limiter la théorie aux trois premiers termes des sommes et le transport CIP sera donc étudié dans la pratique par le modèle simplifié suivant caractérisé par :

– **Les profils de conductivité :**

$$\sigma_i^+(z) = \frac{\sigma_{di}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \left( B_{0i}^+ \psi_0 \left( \frac{z - \alpha_i}{\ell_i} \right) + 3B_{1i}^+ \psi_1 \left( \frac{z - \alpha_i}{\ell_i} \right) + 5B_{2i}^+ \psi_2 \left( \frac{z - \alpha_i}{\ell_i} \right) \right) \right] \quad (6.66)$$

$$\sigma_i^-(z) = \frac{\sigma_{di}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \left( B_{0i}^- \psi_0 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\ell_i} \right) + 3B_{1i}^- \psi_1 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\ell_i} \right) + 5B_{2i}^- \psi_2 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\ell_i} \right) \right) \right] \quad (6.67)$$

où  $\alpha_i$  et  $\alpha_{i+1}$  désignent respectivement les coordonnées des bords inférieur et supérieur de la couche.

- **L'expression de la conductivité intégrée** : A partir de l'expression 6.44, on obtient alors :

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_{di}\Delta_i} = 1 - \frac{3\kappa_i}{4} \begin{bmatrix} C_0 \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) \right) + C_1 \left( \frac{1}{20} - 6\phi_1 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) + 3\phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) \right) \\ - C_2 \left( \frac{1}{4} + 30\phi_2 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) - 30\phi_1 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) + 5\phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_i} \right) \right) \end{bmatrix} \quad (6.68)$$

avec  $C_i = B_i^+ + B_i^-$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Les fonctions  $\phi$  s'écrivant simplement :

$$\phi_0(x) = E_3(x) - E_5(x) \quad \phi_1(x) = E_4(x) - E_6(x) \quad \phi_2(x) = E_5(x) - E_7(x) \quad (6.69)$$

- **Les conditions d'interface** : Les constantes  $B_{0,1,2}^\pm$  sont alors fournies en appliquant les conditions de bords génériques, écrites sous forme matricielle :

$$[B_t^+] = V_1 + [R] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) \right] [B_t^-] + \eta [T] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) \right] [B_b^+] \quad (6.70)$$

$$[B_b^-] = V_2 + [R] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) \right] [B_b^+] + \frac{1}{\eta} [T] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) \right] [B_t^-] \quad (6.71)$$

à chaque interface. Dans ces équations, on a introduit les notations :

$$[B^\pm] = \begin{pmatrix} B_0^\pm \\ B_1^\pm \\ B_2^\pm \end{pmatrix} \quad [\psi(x)] = \begin{pmatrix} \psi_{00}(x) & 3\psi_{01}(x) & 5\psi_{02}(x) \\ \psi_{01}(x) & 3\psi_{11}(x) & 5\psi_{12}(x) \\ \psi_{02}(x) & 3\psi_{12}(x) & 5\psi_{22}(x) \end{pmatrix} \quad (6.72)$$

Les expressions des différentes fonctions  $\psi$  sont fournies dans l'annexe D.4.

$$[R] = \begin{pmatrix} R_0 & 0 & 0 \\ 0 & 3R_1 & 0 \\ 0 & 0 & 5R_2 \end{pmatrix} \quad [T] = \begin{pmatrix} T_0 & 0 & 0 \\ 0 & 3T_1 & 0 \\ 0 & 0 & 5T_2 \end{pmatrix} \quad (6.73)$$

$$V_1 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3}(R_0 + \eta T_0) \\ \frac{1}{2}(R_1 + \eta T_1) \\ \frac{1}{6}(R_2 + \eta T_2) \end{pmatrix} \quad V_2 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3}\left(R_0 + \frac{T_0}{\eta}\right) \\ \frac{1}{2}\left(R_1 + \frac{T_1}{\eta}\right) \\ \frac{1}{6}\left(R_2 + \frac{T_2}{\eta}\right) \end{pmatrix} \quad (6.74)$$

Le facteur  $\eta$  étant toujours donné par le rapport des libres parcours moyen :

$$\eta = \frac{\ell_b}{\ell_t} \quad (6.75)$$

Ainsi, avec toutes les informations de ce paragraphe, on peut traiter un multicouche CIP quelconque. En particulier, l'introduction de la notation matricielle rend aisément programmable la résolution des équations permettant d'obtenir les constantes  $B_{1,2,3}^\pm$ . La connaissance de ces derniers permet ensuite d'accéder aux profils de conductivité ainsi qu'à la conductivité intégrée via les expressions fournies dans ce paragraphe. Notons enfin que contrairement au modèle de Fuchs-Sondheimer, le système d'équation à résoudre pour obtenir les constantes  $B_{1,2,3}^\pm$  ne fait plus intervenir l'angle  $\theta$  relatif à la composante  $v_z$  de la vitesse accélérant ainsi les calculs numériques.

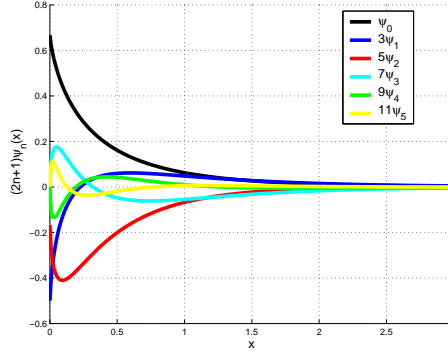


FIGURE 6.5 – Tracé des fonctions  $(2n + 1) \psi_n$  en fonction de  $x$  pour  $n$  allant de zéro à cinq. On constate que plus  $n$  augmente, plus la fonction  $\psi_n$  tend rapidement vers zéro. Les contributions les plus importantes sont donc contenues dans les trois premières fonctions  $\psi_0$ ,  $\psi_1$  et  $\psi_2$ .

### 6.2.6 La polarisation en spin

Nous terminons l'adaptation du modèle collisionnel pour les structures CIP par l'extension en spin. Comme dans le cadre du transport CPP, le transport de volume est décrit en partant de l'équation de Boltzmann polarisée en spin ( $s = \uparrow, \downarrow$ ) :

$$v_z \frac{\partial f_s}{\partial z} - eE v_x \frac{\partial f_s}{\partial \epsilon} = \frac{1}{\tau_s} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_s(\Omega') - f_s(\Omega)) + \frac{1}{\tau_{sf}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_{-s}(\Omega') - f_s(\Omega)) \quad (6.76)$$

dans laquelle on a déjà tenu compte de la géométrie CIP. La résolution est alors complètement similaire à celle du transport de charge dans le sens où la fonction de distribution est développée sur les polynômes de Tchebychev. Les profils de conductivité obtenus sont alors une simple généralisation des relations 6.36 et 6.37 dont nous donnons les expressions tronquées à l'ordre deux (voir paragraphe précédent) :

$$\sigma_{is}^+(z) = \frac{\sigma_{dis}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \left( B_{0is}^+ \psi_0 \left( \frac{(z - \alpha_i)}{\lambda_{is}} \right) + 3B_{1is}^+ \psi_1 \left( \frac{(z - \alpha_i)}{\lambda_{is}} \right) + 5B_{2is}^+ \psi_2 \left( \frac{(z - \alpha_i)}{\lambda_{is}} \right) \right) \right] \quad (6.77)$$

$$\sigma_{is}^-(z) = \frac{\sigma_{dis}}{2} \left[ 1 - \frac{3}{2} \left( B_{0is}^- \psi_0 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\lambda_{is}} \right) + 3B_{1is}^- \psi_1 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\lambda_{is}} \right) + 5B_{2is}^- \psi_2 \left( \frac{(\alpha_{i+1} - z)}{\lambda_{is}} \right) \right) \right] \quad (6.78)$$

où l'on a introduit les notations utilisées pour le transport CPP :

$$\frac{1}{\lambda_s} = \frac{1}{\ell_s} + \frac{1}{\ell_{sf}} \quad \sigma_{ds} = \frac{e^2 n_0 \lambda_s}{2m v_f} \quad (6.79)$$

On remarquera que contrairement au structure CPP, les longueurs de décroissance sont simplement données par les libres parcours généralisés  $\lambda_s$  montrant ainsi que le spin-flip de volume n'agit pas de la même façon suivant que le transport est CPP ou CIP. La conductivité intégrée est alors fournie par une formule identique à 6.44 et les constantes  $B_{is}^\pm$  sont alors données par un système d'équations

similaire à 6.63 et 6.64 en tenant compte de la polarisation en spin et en incluant les processus de spin-flip d'interface. L'extension étant assez naturelle, nous présentons dans l'annexe D.5 les équations pratiques de la théorie à l'ordre deux.

## 6.3 Les apports du modèle collisionnel

Au cours des paragraphes précédents, nous avons présenté l'adaptation du modèle collisionnel pour les structures CIP. Dans cette dernière partie, nous allons regarder quelques conséquences de ce modèle. Dans un premier temps, nous abordons l'effet des paramètres d'interface sur la conductivité. Dans un second temps, nous montrons que le modèle de Fuchs-Sondheimer constitue un cas limite du modèle collisionnel. Ayant à disposition la solution exacte de l'équation de Boltzmann, la troisième partie sera consacrée à la comparaison de cette solution avec celle obtenue par différentes méthodes de projection. Enfin, nous montrons dans la dernière partie qu'il est possible d'établir un modèle macroscopique pour le transport CIP.

### 6.3.1 Effets des paramètres d'interface sur la conductivité

Dans cette première partie, nous allons détailler l'effet des paramètres d'interface sur les profils de conductivité et la conductivité intégrée pour la théorie à l'ordre deux établies au paragraphe 6.2.5. Ces effets sont abordés en considérant le cas de la monocouche (figure 6.2) et nous allons donc étudier l'influence des coefficients de réflexion généralisés  $R_0$ ,  $R_1$  et  $R_2$  que nous supposons identiques pour les deux bords de la couche. Les profils de conductivité sont fournis par les expressions 6.66 et 6.67 et la conductivité intégrée par 6.68.

Pour étudier les effets de ces trois coefficients de réflexion, nous allons présenter l'effet de chacun pris séparément, les autres étant nuls. Remarquons que la théorie simplifiée présentée au paragraphe 6.2.5 est autocohérente dans la mesure où l'annulation du coefficient de réflexion  $R_n$  annulent simultanément les composantes  $B_n^\pm$  correspondantes sauf pour les composantes d'ordre zéro qui valent 1 lorsque tous les coefficients de réflexion s'annulent. Nous avons donc la propriété suivante :

$$B_0^\pm = 1 \quad \text{et} \quad B_n^\pm = 0 \quad \Leftrightarrow \quad R_n = 0 \quad \forall n \quad (6.80)$$

Ceci montre en particulier que lorsque tous les coefficients de réflexion sont nuls, la théorie tronquée à l'ordre deux fournit la solution exacte caractérisée par les profils de conductivité :

$$\frac{\sigma^+(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} - \frac{3}{4} \left[ E_2 \left( \frac{(z+a)}{\ell} \right) - E_4 \left( \frac{(z+a)}{\ell} \right) \right] \quad (6.81)$$

$$\frac{\sigma^-(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} - \frac{3}{4} \left[ E_2 \left( \frac{(a-z)}{\ell} \right) - E_4 \left( \frac{(a-z)}{\ell} \right) \right] \quad (6.82)$$

$$\frac{\sigma(\Delta)}{\sigma_d \Delta} = 1 - \frac{3\kappa}{2} \left[ \frac{1}{4} - \left( E_3 \left( \frac{1}{\kappa} \right) - E_5 \left( \frac{1}{\kappa} \right) \right) \right] \quad (6.83)$$



où  $\kappa = \frac{\ell}{\Delta}$  est le nombre de Knudsen de la couche et  $E_n$  désigne l'exponentielle intégrale d'ordre  $n$  (annexe D.3). On remarque que ces profils de conductivité vérifient la condition d'interface :

$$\sigma^\pm(\mp a) = 0 \quad (6.84)$$

conséquence du fait qu'en l'absence de collisions à l'interface ( $R_n$  nuls), les parties hors-équilibre des fonctions de distribution vérifient une condition d'annulation aux bords :

$$g^\pm(\mp a, \theta) = 0 \quad (6.85)$$

Les profils 6.81 à 6.83 ne font alors intervenir que les dépendances spatiales relatifs aux fonctions  $\psi_0$  et  $\phi_0$  et vont servir de référence pour la compréhension des collisions d'interface.

En présence de réflexions aux interfaces, les constantes  $B_{0,1,2}^\pm$  sont obtenues à partir des conditions d'interface 6.70 et 6.71 dans lesquelles les processus de transmission ont été annulés. Compte tenu des hypothèses retenues ici, les solutions des équations obtenues s'écrivent alors formellement :

$$[B^+] = [B^-] = \left[ I_3 - [R] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa} \right) \right] \right]^{-1} V \quad (6.86)$$

où  $I_3$  est la matrice identité  $3 \times 3$  et dans laquelle nous avons utilisé la notation matricielle du paragraphe 6.2.5 ( $V_1 = V_2 = V$  ici).

De manière générale, la présence de réflexion aux interfaces rend caduque la condition de bord 6.84 et donne ainsi une valeur non nulle aux profils de conductivité chirale en ces points. Les figures 6.6 et 6.7 montrent l'évolution de la conductivité intégrée et des profils de conductivité lorsqu'on fait varier les valeurs des paramètres d'interface. On constate que les coefficients de réflexion  $R_0$  et  $R_1$  augmentent le niveau de conductivité de la couche (figures (a) et (b) de 6.6 et 6.7) alors que  $R_2$  la diminue (figure (c) de 6.6 et 6.7). Le coefficient de réflexion  $R_0$  a un effet global sur la conductivité dans la mesure où il influe à toute épaisseur alors que les coefficients  $R_1$  et  $R_2$  n'ont d'influence que pour des nombre de Knudsen supérieur à l'unité traduisant ainsi des effets, de basse épaisseur, essentiels pour les nanostructures. On notera en particulier le rôle important du coefficient de réflexion  $R_1$  qui permet de contrôler complètement la décroissance de la conductivité à basse épaisseur (grands  $\kappa$ ) en faisant apparaître des plateaux de conductivité qui n'influencent d'aucune façon la décroissance linéaire de grandes épaisseurs (petits  $\kappa$ ). Les coefficients de réflexion  $R_0$ ,  $R_1$  et  $R_2$  sont alors complémentaires puisque  $R_0$  fixe un niveau moyen de conductivité et plus particulièrement la décroissance de grande épaisseur,  $R_1$  contrôle la décroissance de basse épaisseur et le coefficient de réflexion  $R_2$  permet alors d'effectuer la balance entre les deux coefficients  $R_0$  et  $R_1$  en ajustant les décroissances de grande et petite épaisseurs. Notons pour terminer que les plages de valeurs explorées pour les coefficients de réflexion  $R_0$ ,  $R_1$  et  $R_2$  dans les figures 6.6 et 6.7 ont été guidées par le fait que la conductivité doit rester une quantité positive et décroissante avec l'épaisseur.

Toutes ces propriétés s'étendent à un multicouche dans la mesure où les coefficients de transmission généralisés  $T_0$ ,  $T_1$  et  $T_2$  agissent de la même façon que  $R_0$ ,  $R_1$  et  $R_2$  sur la conductivité du multicouche.

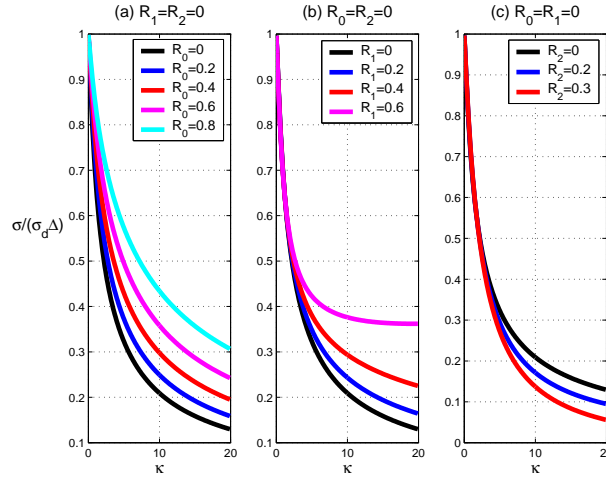


FIGURE 6.6 – Evolution de la conductivité intégrée en fonction du nombre de Knudsen pour différentes valeurs des coefficients de réflexion. La figure (a) présente l'effet de  $R_0$ , la figure (b) celui de  $R_1$  et la figure (c) celui de  $R_2$ . Dans chaque cas, les autres coefficients de réflexion sont mis à zéro. La courbe noire correspond toujours à l'expression 6.83 obtenue pour aucune réflexion d'interface.

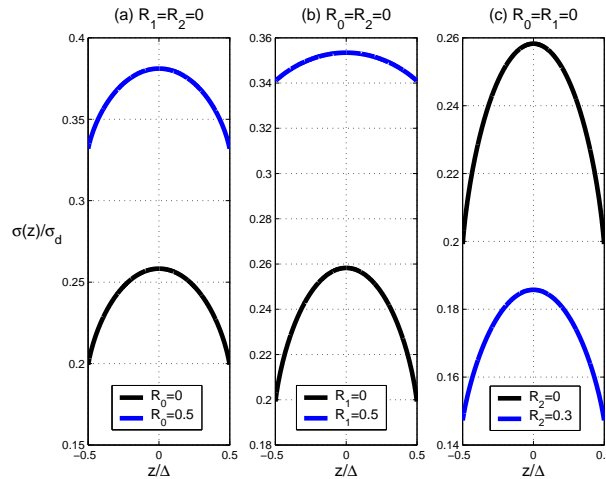


FIGURE 6.7 – Evolution des profils de conductivité en fonction des coefficients de réflexion. La figure (a) présente l'effet de  $R_0$ , la figure (b) celui de  $R_1$  et la figure (c) celui de  $R_2$ . Dans chaque cas, les autres coefficients de réflexion sont mis à zéro. La courbe noire correspond toujours aux expressions 6.81 et 6.82 obtenues pour aucune réflexion d'interface. Le nombre de Knudsen est posé à 8.

### 6.3.2 La limite Fuchs-Sondheimer

Dans cette section, nous allons replacer le modèle de Fuchs-Sondheimer au sein du modèle collisionnel et comprendre ainsi la physique supplémentaire contenue dans ce dernier.

La chose un peu étonnante est que pour le transport CIP, le modèle collisionnel et le modèle de Fuchs-Sondheimer fournissent les mêmes expressions des fonctions de distribution. Pour rendre cela plus transparent, rappelons que le modèle collisionnel, basé sur l'équation de Boltzmann 6.14 avec une intégrale de collision isotrope, a permis de montrer que la partie hors-équilibre de la fonction de distribution n'avait qu'une composante d'ordre deux non nulle sur les polynômes de Tchebychev permettant ainsi d'accéder aux expressions exactes 6.46 et 6.47 de ces fonctions de distribution. On constate alors que la linéarisation du modèle de Fuchs-Sondheimer (voir paragraphe 6.1.2) autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique conduit aux mêmes expressions 6.46 et 6.47 des parties hors-équilibre des fonctions de distribution. Ainsi, bien que le modèle de Fuchs-Sondheimer soit basé sur une équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation, les fonctions de distribution qu'il fournit ont un domaine de validité plus large dans le sens où elles correspondent également aux solutions d'une équation de Boltzmann tenant compte de la nature intégrale des phénomènes de collision. Cette propriété découle en fait de l'isotropie de l'intégrale de collision que nous avons retenue qui n'affecte pas la composante d'ordre deux des fonctions de distribution sur les polynômes de Tchebychev et explique pourquoi le modèle de Fuchs-Sondheimer fournit le bon ordre de grandeur pour les effets d'épaisseur sur la conductivité bien que l'intégrale de collision soit mal décrite.

Ainsi, les modèles de Fuchs-Sonheimer et collisionnel sont décrits par la même physique de volume et ne diffèrent que par les conditions d'interface. Les conditions de collision spéculaires 6.7 et 6.8 du modèle de Fuchs-Sondheimer ne sont alors qu'un cas particulier des conditions de collision du modèle collisionnel puisqu'elles s'obtiennent des équations intégrales 6.55 et 6.56 en adoptant le choix suivant pour les taux de collision :

$$\frac{\overline{W}_{tt}^2(\theta, \theta')}{2} = \frac{\overline{W}_{bb}^2(\theta, \theta')}{2} = R\delta(\cos\theta - \cos\theta') \quad (6.87)$$

et

$$\frac{\overline{W}_{tb}^2(\theta, \theta')}{2} = \frac{\overline{W}_{bt}^2(\theta, \theta')}{2} = T\delta(\cos\theta - \cos\theta') \quad (6.88)$$

décrivant ainsi des collisions conservant l'angle  $\theta$  de la composante  $v_z$  de la vitesse.

La figure 6.8 présente l'évolution de la conductivité intégrée pour une monocouche en fonction du coefficient de réflexion spéculaire (figure (a)) pour le modèle de Fuchs-Sondheimer et en fonction du coefficient de réflexion  $R_0$  (figure (b)) pour le modèle collisionnel. On constate alors que le coefficient de réflexion spéculaire agit sur la conductivité de la même façon que le coefficient  $R_0$  du modèle collisionnel bien qu'étant de nature différente. Ainsi, le coefficient de réflexion spéculaire agit à toute épaisseur sur la conductivité d'un matériau et

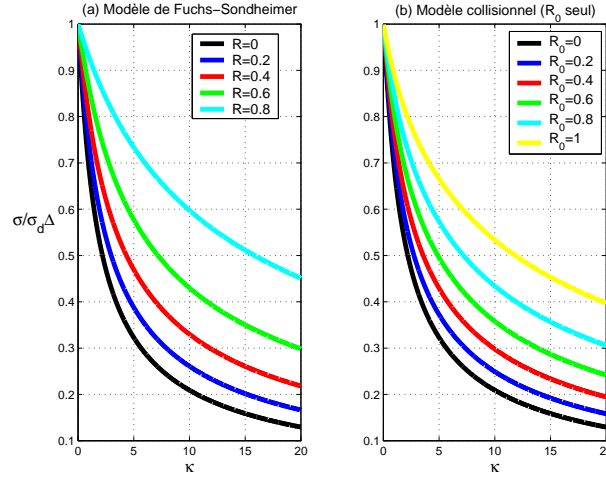


FIGURE 6.8 – Evolution de la conductivité intégrée en fonction du nombre de Knudsen pour : (a) différentes valeurs du coefficient de réflexion spéculaire du modèle de Fuchs-Sondheimer et (b) plusieurs valeurs du coefficient  $R_0$  du modèle collisionnel. On remarquera la similitude des courbes obtenues, nous permettant ainsi de comprendre que le coefficient de réflexion spéculaire contient la même physique que  $R_0$ .

le modèle de Fuchs-Sondheimer ne contient pas les effets de basses épaisseurs contenus dans les coefficients de réflexion  $R_1$  et  $R_2$  caractéristiques du modèle collisionnel. Notons enfin qu'en l'absence de réflexions aux interfaces, le modèle de Fuchs-Sondheimer conduit également aux expressions 6.81 à 6.83 des grandeurs macroscopiques. Au chapitre suivant, nous présentons une méthode variationnelle pour le modèle de Fuchs-Sondheimer permettant de mieux comprendre l'équivalence entre le paramètre spéculaire  $R$  et le coefficient de réflexion d'ordre zéro  $R_0$ .

### 6.3.3 Comparaison avec une approche projective

La dérivation du modèle macroscopique pour le transport CIP utilise les mêmes ingrédients que ceux du transport CPP (polynômes orthogonaux, intégrale de collision d'interface, ...). Néanmoins, on peut constater que le passage entre les descriptions microscopique et macroscopique ne s'effectue pas de la même façon. Ceci provient du fait que l'expression exacte de la fonction de distribution est connue en géométrie CIP. En particulier, à partir des expressions 6.46 et 6.47 nous voyons que celles-ci s'écrivent sous la forme :

$$g^\pm(z, \theta) = eE\ell \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} h^\pm(z, \theta) \quad (6.89)$$

où les fonctions  $h^\pm$  satisfont les équations différentielles très simples :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial h^\pm}{\partial z} + \frac{h^\pm}{\ell} = \frac{1}{\ell} \quad (6.90)$$

et dont les solutions s'écrivent :

$$h^\pm(z, \theta) = 1 - B^\pm(\theta) e^{\frac{(\mp z - a)}{\ell \cos \theta}} \quad (6.91)$$

De ce fait, seules les fonctions  $B^\pm(\theta)$  ont été développées sur la base des polynômes de Legendre décalés (relation 6.34) pour dériver le modèle macroscopique.

Par analogie avec le transport CPP, on peut également résoudre les équations 6.90 en développant directement les fonctions  $h^\pm$  sur les polynômes de Legendre décalés :

$$h^\pm(z, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} h_n^\pm(z) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (6.92)$$

Toujours par analogie avec le transport CPP, on peut également voir les deux équations 6.90 comme la chiralisation de l'équation unique :

$$\cos \theta \frac{\partial h}{\partial z} + \frac{h}{\ell} = \frac{1}{\ell} \quad (6.93)$$

dans laquelle l'angle  $\theta$  appartient maintenant à l'intervalle  $[0, \pi]$  et résoudre cette dernière en décomposant la fonction  $h$  sur les polynômes de Legendre ordinaires :

$$h(z, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} h_\ell(z) P_\ell(\cos \theta) \quad (6.94)$$

Cette seconde procédure est alors identique à celle utilisée pour construire le modèle dérive-diffusion du transport CPP et constitue une approche diffusive des structures CIP.

Dans la pratique, pour résoudre les équations 6.90 (respectivement 6.93), il est nécessaire comme pour le transport CPP de tronquer les développements 6.92 (respectivement 6.94) à un certain ordre. On obtient alors des expressions approchées  $h^\pm(z)$  (respectivement  $h(z)$ ) des fonctions de distribution. Connaissant l'expression exacte de ces dernières (relation 6.91), nous allons comparer les solutions approchées obtenues par les méthodes de projection directe à la solution 6.91 correspondante. Ce travail permet en particulier de faire apparaître une certaine unité entre les transports CIP et CPP.

A titre d'exemple, nous considérons ici le cas d'une monocouche (figure 6.2) sans réflexions aux deux bords pour laquelle les conditions de bords sont :

$$h^\pm(\mp a, \theta) = 0 \quad (6.95)$$

de sorte que les fonctions de distribution 6.91 prennent la forme exacte :

$$h^\pm(z, \theta) = 1 - e^{\frac{(\mp z - a)}{\ell \cos \theta}} \quad (6.96)$$

Les profils de conductivité associés s'écrivent alors :

$$\frac{\sigma^\pm(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} - \frac{3}{4} \left[ E_2 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) - E_4 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) \right] \quad (6.97)$$

Nous allons à présent construire des solutions approchées pour les fonctions  $h^\pm$  (6.92) et  $h$  (6.94) en utilisant les méthodes de projection directes.

### La projection chirale directe

Dans cette section, on résoud les équations 6.90 en utilisant les développements 6.92 des fonctions  $h^\pm$  sur les polynômes de Legendre décalés. Comme pour le transport CPP, il faut déterminer l'ordre à partir duquel le développement 6.92 sera tronqué. Pour cela, il suffit de déterminer les composantes  $h_n^\pm$  intervenant dans les expressions des profils de conductivité. On vérifie que celles-ci s'écrivent<sup>3</sup> :

$$\frac{\sigma^\pm(z)}{\sigma_d} = \frac{3}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta h^\pm(z) = \frac{1}{2} h_0^\pm - \frac{1}{8} h_1^\pm - \frac{1}{40} h_2^\pm \quad (6.98)$$

Les conductivités ne font donc intervenir que les trois premières composantes du développement 6.92 et nous allons donc résoudre les équations 6.90 par une projection tronquée à l'ordre deux.

Les trois premières composantes  $h_0^\pm$ ,  $h_1^\pm$  et  $h_2^\pm$  vérifient les équations :

$$\pm \frac{1}{2} \frac{\partial h_0^\pm}{\partial z} \pm \frac{1}{6} \frac{\partial h_1^\pm}{\partial z} + \frac{h_0^\pm}{\ell} = \frac{1}{\ell} \quad (6.99)$$

$$\pm \frac{1}{2} \frac{\partial h_0^\pm}{\partial z} \pm \frac{1}{2} \frac{\partial h_1^\pm}{\partial z} + \frac{1}{5} \frac{\partial h_2^\pm}{\partial z} + \frac{h_1^\pm}{\ell} = 0 \quad (6.100)$$

$$\pm \frac{1}{3} \frac{\partial h_1^\pm}{\partial z} \pm \frac{1}{2} \frac{\partial h_2^\pm}{\partial z} + \frac{h_2^\pm}{\ell} = 0 \quad (6.101)$$

dont les solutions prennent la forme générale :

$$h_0^\pm(z) = 1 + \lambda_1 e^{\frac{2(\mp z - a)}{\ell}} + \lambda_2 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} - \sqrt{3})\ell}} + \lambda_3 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} + \sqrt{3})\ell}} \quad (6.102)$$

$$h_1^\pm(z) = -\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{5}} \left( \lambda_2 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} - \sqrt{3})\ell}} - \lambda_3 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} + \sqrt{3})\ell}} \right) \quad (6.103)$$

$$h_2^\pm(z) = -\frac{5}{2} \lambda_1 e^{\frac{2(\mp z - a)}{\ell}} + 2\lambda_2 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} - \sqrt{3})\ell}} + 2\lambda_3 e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} + \sqrt{3})\ell}} \quad (6.104)$$

Les constantes d'intégration  $\lambda_i$  sont fixées par les conditions de bords 6.95. L'annulation de la fonction de distribution impliquent l'annulation de chaque composante du développement 6.92 :

$$h^\pm(\mp a, \theta) = 0 \Rightarrow h_n^\pm(\mp a) = 0 \quad (6.105)$$

Au final, on obtient une expression approchée des profils de conductivité  $\sigma^\pm(z)$  :

$$\frac{\sigma^\pm(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} e^{\frac{2(\mp z - a)}{\ell}} - \frac{5}{18} \left[ \left( \frac{11}{20} + \frac{3\sqrt{3}}{8\sqrt{5}} \right) e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} - \sqrt{3})\ell}} + \left( \frac{9}{20} - \frac{3\sqrt{3}}{8\sqrt{5}} \right) e^{\frac{2\sqrt{5}(\mp z - a)}{(\sqrt{5} + \sqrt{3})\ell}} \right] \quad (6.106)$$

3. en utilisant  $\sin^2 \theta = \frac{2}{3} \bar{P}_0 - \frac{1}{2} \bar{P}_1 - \frac{1}{6} \bar{P}_2$ .

Remarque : Notons qu'à partir des expressions 6.96 des fonctions de distribution  $h^\pm$ , on peut déterminer les expressions exactes des composantes  $h_0^\pm$ ,  $h_1^\pm$  et  $h_2^\pm$  puisqu'il suffit de projeter les expressions 6.96 sur les polynômes de Legendre décalés. Celles-ci prennent alors la forme :

$$h_0^\pm(z) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta h^\pm(z, \theta) = 1 - E_2 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) \quad (6.107)$$

$$h_1^\pm(z) = 3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_1(\cos \theta) h^\pm(z, \theta) = 3E_2 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) - 6E_3 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) \quad (6.108)$$

$$h_2^\pm(z) = 5 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_2(\cos \theta) h^\pm(z, \theta) = -5E_2 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) + 30E_3 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) - 30E_4 \left( \frac{(a \pm z)}{\ell} \right) \quad (6.109)$$

En injectant ces expressions dans la formule de conductivité 6.98, on retrouve bien les profils exacts 6.97. On note que la méthode de projection a remplacé les exponentielles intégrales par des exponentielles ordinaires.

### La projection diffusive directe

Nous construisons maintenant une solution approchée des profils de conductivité en projetant l'équation non chirale 6.93 sur les polynômes de Legendre ordinaires (développement 6.94). Comme précédemment, l'ordre de troncature est déterminé par l'expression du profil de conductivité. Celui-ci fait intervenir les composantes d'ordre zéro et deux du développement 6.94 de la fonction de distribution :

$$\frac{\sigma(z)}{\sigma_d} = \frac{3}{4} \int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta h(z, \theta) = h_0 - \frac{1}{5} h_2 \quad (6.110)$$

Nous allons donc résoudre l'équation 6.93 par une projection limitée à l'ordre deux. Les fonctions  $h_0$ ,  $h_1$  et  $h_2$  vérifient les équations :

$$\frac{1}{3} \frac{\partial h_1}{\partial z} + \frac{h_0}{\ell} = \frac{1}{\ell} \quad (6.111)$$

$$\frac{\partial h_0}{\partial z} + \frac{2}{5} \frac{\partial h_2}{\partial z} + \frac{h_1}{\ell} = 0 \quad (6.112)$$

$$\frac{2}{3} \frac{\partial h_1}{\partial z} + \frac{h_2}{\ell} = 0 \quad (6.113)$$

dont les solutions s'écrivent sous la forme générale :

$$h_0(z) = 1 + \lambda_1 e^{-\frac{\sqrt{5}(z+a)}{\ell\sqrt{3}}} + \lambda_2 e^{\frac{\sqrt{5}(z-a)}{\ell\sqrt{3}}} \quad (6.114)$$

$$h_1(z) = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{5}} \left( \lambda_1 e^{-\frac{\sqrt{5}(z+a)}{\ell\sqrt{3}}} - \lambda_2 e^{\frac{\sqrt{5}(z-a)}{\ell\sqrt{3}}} \right) \quad (6.115)$$

$$h_2(z) = 2 \left( \lambda_1 e^{-\frac{\sqrt{5}(z+a)}{\ell\sqrt{3}}} + \lambda_2 e^{\frac{\sqrt{5}(z-a)}{\ell\sqrt{3}}} \right) \quad (6.116)$$

Les deux constantes d'intégration  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont déterminées par les conditions d'interfaces.

Le plus délicat avec les approches diffusives est la détermination des conditions de bords. Il est clair qu'imposer la nullité des composantes  $h_n$  aux bords de la couche constitue une condition trop forte et une condition plus adaptée est obtenue en remarquant que les conditions de bords 6.95 induisent l'annulation des profils de conductivités chiraux aux bords de la couche :

$$\sigma^\pm(z = \mp a) = 0 \quad (6.117)$$

Comme pour le modèle dérive-diffusion, les conductivités chirales sont obtenues en intégrant 6.110 sur les cadrans  $[0, \frac{\pi}{2}]$  et  $[\frac{\pi}{2}, \pi]$ .  $\sigma^+(z)$  et  $\sigma^-(z)$  prennent alors la forme :

$$\frac{\sigma^+(z)}{\sigma_d} = \frac{3}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta h(z, \theta) = \frac{1}{2} \left[ h_0(z) + \frac{3}{8} h_1(z) - \frac{1}{5} h_2(z) \right] \quad (6.118)$$

$$\frac{\sigma^-(z)}{\sigma_d} = \frac{3}{4} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\theta \sin^3 \theta h(z, \theta) = \frac{1}{2} \left[ h_0(z) - \frac{3}{8} h_1(z) - \frac{1}{5} h_2(z) \right] \quad (6.119)$$

L'utilisation des conditions de bords 6.117 conduit alors aux expressions :

$$\frac{\sigma^\pm(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} - \frac{5 \left( \left( \frac{3}{5} \pm \frac{9\sqrt{3}}{8\sqrt{5}} \right) e^{-\frac{\sqrt{5}(z+a)}{\ell\sqrt{3}}} + \left( \frac{3}{5} \mp \frac{9\sqrt{3}}{8\sqrt{5}} \right) e^{\frac{\sqrt{5}(z-a)}{\ell\sqrt{3}}} \right)}{6 \left[ \left( 1 + e^{-\frac{\sqrt{5}}{\kappa\sqrt{3}}} \right) + \frac{3\sqrt{3}}{8} \left( 1 - e^{-\frac{\sqrt{5}}{\kappa\sqrt{3}}} \right) \right]} \quad (6.120)$$

des profils de conductivité dans l'approximation diffusive.

Au final, en utilisant les expressions exactes 6.98 et approchées 6.106 et 6.120, on obtient trois profils de conductivité  $\sigma(z) = \sigma^+(z) + \sigma^-(z)$ . La figure 6.9 compare alors les conductivités intégrées (figure (a)) et les profils de conductivité (figure (b)) obtenue pour ces différentes solutions. Nous voyons sur la figure (a) que la projection sur les polynômes de Legendre décalés fournit la meilleure solution approchée. L'approche diffusive prédit une décroissance beaucoup plus rapide de la conductivité. On note que bien que le profil 6.106 ait été obtenu à partir de la théorie minimale tronquée à l'ordre deux, la conductivité intégrée obtenue constitue une excellente approximation du résultat exact. La figure 6.9 (b) présente un exemple de profil de conductivité pour  $\kappa = 8$ . On constate que le profil obtenu par la projection sur les polynômes de Legendre décalés est le plus proche du résultat exact conformément aux courbes de conductivités intégrées de la figure (a).

Remarque : De façon générale, on peut constater que les méthodes de projection remplacent toujours les fonctions exponentielles intégrales (annexe D.3) par des exponentielles ordinaires. À l'aide de ce travail, on peut alors donner une interprétation aux exponentielles intégrales. Les expressions exactes des composantes  $h_n^\pm$  du développement 6.92 s'écrivent toujours comme des combinaisons linéaires d'exponentielles intégrales. Or, en projetant exactement les équations chirales 6.90 sur les polynômes de Legendre décalés, on peut constater que les composantes  $h_n^\pm$  vérifient toujours une équation différentielle linéaire à coefficients constants d'ordre infini :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n \frac{\partial^n h_0^+}{\partial z^n} = 1 \quad (6.121)$$



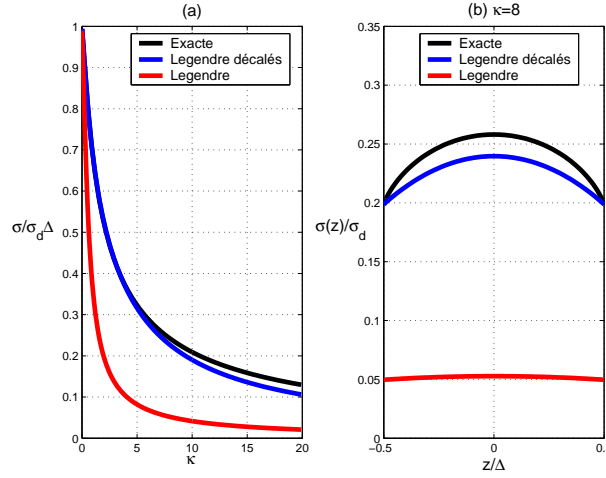


FIGURE 6.9 – Tracé de la conductivité intégrée ( $\sigma = \int dz\sigma(z)$ ) (figure (a)) en fonction du nombre de Knudsen et du profil de conductivité (figure (b)) pour  $\kappa = 8$ . Dans chaque cas, on compare la solution exacte (courbe noire, expression 6.98), la solution obtenue par projection sur les polynômes de Legendre décalés (courbe bleue, expression 6.106) et celle fournie par la projection sur les polynômes de Legendre ordinaires (courbe rouge, 6.120).

Les solutions s'écrivent donc sous forme d'une somme infinie de fonctions exponentielle dont les longueurs de décroissance sont données par les racines de l'équation :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n x^n = 0 \quad (6.122)$$

et dont la somme converge vers une combinaison d'exponentielles intégrales. Ainsi, ces fonctions spéciales caractérisent le comportement d'un système linéaire ayant une infinité de longueurs caractéristiques.

Notons pour terminer que quel que soit le type de transport (CPP<sup>4</sup> ou CIP), les dépendances spatiales des grandeurs moyennes sont toujours décrites par la fonction exponentielle intégrale. Ces fonctions peuvent toujours être vues comme des combinaisons d'exponentielles ordinaires et la projection de l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Legendre décalés permet alors d'effectuer cette conversion. Ceci explique en particulier pourquoi la fonction exponentielle ordinaire s'introduit naturellement pour le transport CPP au lieu de la fonction exponentielle intégrale.

4. voir par exemple le problème de Milne pour s'en convaincre.

### 6.3.4 Modèle macroscopique

Nous terminons l'étude des structures CIP en montrant qu'il est possible de dériver un modèle de transport macroscopique caractéristique du transport de volume. Pour cela, nous rappelons la définition des courants chiraux :

$$J_x^\pm(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} v_x f^\pm(z, \mathbf{v}) = \sigma_d E \left[ \frac{1}{2} h_0^\pm(z) - \frac{1}{8} h_1^\pm(z) - \frac{1}{40} h_2^\pm(z) \right] \quad (6.123)$$

où  $E$  désigne le champ électrique et dans laquelle on a introduit les composantes  $h_n^\pm$  du développement 6.92 du paragraphe précédent. Pour établir le modèle de transport macroscopique, nous allons utiliser les équations 6.99 à 6.101 obtenues par troncature à l'ordre deux de l'équation de Boltzmann.

On introduit alors les trois courants chiraux :

$$J_0^\pm = \frac{\sigma_d E}{2} h_0^\pm \quad J_1^\pm = -\frac{\sigma_d E}{8} h_1^\pm \quad J_2^\pm = -\frac{\sigma_d E}{40} h_2^\pm \quad (6.124)$$

qui, en utilisant les équations 6.99 à 6.101, vérifient les équations de transport macroscopiques :

$$\pm \frac{\partial J_0^\pm}{\partial z} \mp \frac{4}{3} \frac{\partial J_1^\pm}{\partial z} + \frac{2}{\ell} J_0^\pm = \frac{\sigma_d E}{\ell} \quad (6.125)$$

$$\pm \frac{\partial J_0^\pm}{\partial z} \mp 4 \frac{\partial J_1^\pm}{\partial z} \mp 8 \frac{\partial J_2^\pm}{\partial z} - \frac{8}{\ell} J_1^\pm = 0 \quad (6.126)$$

$$\pm \frac{8}{3} \frac{\partial J_1^\pm}{\partial z} \pm 20 \frac{\partial J_2^\pm}{\partial z} + \frac{40}{\ell} J_2^\pm = 0 \quad (6.127)$$

Ces trois courants permettent alors de déterminer les courants de charge chiraux par simple addition :

$$J_x^\pm(z) = J_0^\pm(z) + J_1^\pm(z) + J_2^\pm(z) \quad (6.128)$$

Contrairement au transport CPP, les équations de transport sont découplées entre chiralité puisque l'intégrale de collision isotrope n'affecte pas les fonctions de distribution chirales en géométrie CIP. D'autre part, par analogie avec le transport CPP, ces courants sont de type anisotrope (au même titre que  $J_1^\pm$ ). Il est intéressant de résoudre ces équations en augmentant l'ordre de troncature, c'est à dire en négligeant les contributions  $J_1^\pm$  et  $J_2^\pm$  (ordre 0), puis en conservant uniquement les deux premières composantes  $J_0^\pm$  et  $J_1^\pm$  (ordre un) et enfin en conservant les trois composantes (ordre 2), afin de comprendre le rôle de chaque contribution. La figure 6.10 compare alors la conductivité intégrée exacte (courbe noire) correspondant à une monocouche sans réflexions d'interface ( $h^\pm(\mp a) = 0$ ). On constate que plus l'ordre de troncature augmente, meilleur est l'accord avec la solution exacte. En particulier, on constate que la contribution  $J_0$  (courbe rouge) décrit bien la conductivité pour des petits nombres de Knudsen (régime hydrodynamique). Les composantes  $J_1$  (courbe violette) et  $J_2$  (courbe bleue) deviennent alors importantes à mesure que le nombre de Knudsen augmente. Ainsi, les équations de transport 6.125 à 6.127 réalise un développement en puissance du nombre de Knudsen du courant dans

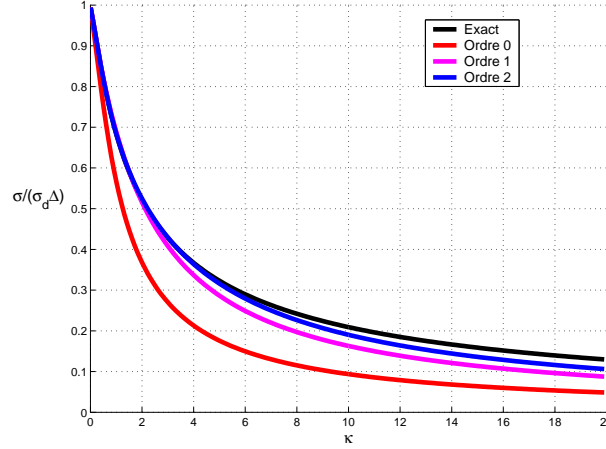


FIGURE 6.10 – Comparaison de la conductivité intégrée en fonction du nombre de Knudsen pour différents ordres de troncature des équations de transport 6.125 à 6.127. Plus l'ordre de troncature augmente et plus l'écart à la solution exacte diminue à mesure que le nombre de Knudsen augmente, on effectue donc un développement en puissance du nombre de Knudsen. Ces courbes de conductivité correspondent aux conditions de bord  $g^\pm(\mp a) = 0$  pour la monocouche de la figure 6.2.

les structures CIP. Cette propriété est similaire à celle des équations de transport des structures CPP et résulte de la projection de l'équation de Boltzmann sur une base de polynômes tronquée.

Dans le cadre du transport CPP, nous avons montré que le courant de charge dérivait d'un potentiel électrochimique généralisé. La question assez naturelle est : peut-on écrire le courant comme la dérivée d'une certaine quantité pour le transport CIP ? Pour cela, on introduit la composante non diagonale du tenseur de pression :

$$\Pi_{xz}^\pm(z) = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v} (\pm) v_x v_z f^\pm(z, \mathbf{v}) \quad (6.129)$$

$$= \pm \sigma_d v_f E \left[ \frac{3}{16} h_0^\pm(z) + \frac{1}{80} h_1^\pm(z) - \frac{3}{80} h_2^\pm(z) - \frac{3}{560} h_3^\pm(z) \right] \quad (6.130)$$

dont on remarquera que dimensionnellement il est proportionnel au produit d'un courant par une vitesse ( $\Pi \propto J \times v_f$ ). La quantité  $\Pi_{xz}$  représente le flux du courant. Travaillant à l'ordre deux, on négligera la composante d'ordre trois  $h_3^\pm$  et cette composante de la pression peut alors être exprimée à partir des trois courants  $J_0^\pm$ ,  $J_1^\pm$  et  $J_2^\pm$  :

$$\Pi_{xz}^\pm(z) = \pm v_f \left[ \frac{3}{8} J_0^\pm(z) - \frac{1}{10} J_1^\pm(z) + \frac{3}{2} J_2^\pm(z) \right] \quad (6.131)$$

En utilisant les équations de transport 6.125 à 6.127, on montre alors que les courants chiraux dérivent effectivement de la composante  $\Pi_{xz}^\pm$  du tenseur des

pressions :

$$J_x^\pm(z) = \frac{\sigma_d E}{2} - \tau \frac{\partial \Pi_{xz}^\pm}{\partial z} \quad (6.132)$$

rappelant fortement la structure du courant en structure CPP. Notons que cette expression est exacte (indépendante de l'ordre de troncature) et peut être obtenue par intégration directe de l'équation de Boltzmann 6.14.

Nous voyons donc qu'on peut également établir un modèle de transport macroscopique pour le transport CIP et que le courant dérive toujours d'une certaine quantité qui est ici la pression en remplacement du potentiel électrochimique. Notons enfin qu'il est également possible d'écrire des équations d'interface macroscopiques pour les quantités  $J_0^\pm$ ,  $J_1^\pm$  et  $J_2^\pm$  à partir des intégrales de collision d'interface.

## 6.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté l'adaptation du modèle collisionnel au transport dans les structures CIP. Nous avons ainsi montré que le formalisme introduit par ce modèle pouvait être appliqué que le transport soit CPP ou CIP unifiant ainsi ces deux types de structures sous un même formalisme. L'introduction de deux bases de polynômes orthogonaux a permis d'une part de mieux comprendre l'origine de l'absence d'accumulation dans la géométrie CIP et d'autre part d'introduire des paramètres d'interface dont la pertinence semble justifiée à l'échelle nanométrique. L'existence de solutions exactes pour ce type de structure a permis de montrer l'intérêt des polynômes de Legendre décalés ainsi que les limites d'une approche diffusive. Nous avons également établi que le modèle le plus répandu de Fuchs-Sondheimer ne constitue qu'un cas particulier du modèle collisionnel et qu'il est possible de dériver un modèle de transport macroscopique pour les structures CIP.

## Chapitre 7

# Approche variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Le modèle de Fuchs-Sondheimer . . . . .</b>	<b>148</b>
<b>7.2</b>	<b>Mise sous forme variationnelle . . . . .</b>	<b>152</b>
<b>7.3</b>	<b>Conclusion : origine du modèle collisionnel . . . .</b>	<b>161</b>

---

Dans ce dernier chapitre, également consacré au transport CIP, nous présentons une approche variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer. A la vue du travail présenté jusqu'à maintenant, on pourrait se poser la question de l'utilité de chercher une solution au modèle de Fuchs-Sondheimer puisque le modèle collisionnel comble les lacunes de ce modèle. Pour la petite histoire, le modèle collisionnel est en fait né de l'interprétation des résultats obtenus de l'approche variationnelle que nous présentons ici et le modèle collisionnel a donc été développé d'abord pour le transport CIP avant d'être adapté aux structures CPP<sup>1</sup>. Nous avons donc choisi de présenter cette méthode variationnelle afin de donner, en conclusion de ce chapitre, les quelques idées qui ont conduit aux développements du modèle collisionnel ainsi que pour l'originalité de la méthode qui fournit une autre façon de penser les conditions de bords. De plus cette méthode donne aussi une solution analytique au modèle de Fuchs-Sondheimer.

Nous traiterons uniquement le cas d'une monocouche CIP et nous utiliserons les conventions de la figure 6.2. On commence par quelques rappels sur le modèle de Fuchs-Sondheimer et nous expliquerons ensuite sa mise sous forme variationnelle.

---

1. à la différence de la présentation faite de ce modèle dans cette thèse.

## 7.1 Le modèle de Fuchs-Sondheimer

Dans cette première partie, nous présentons les difficultés associées au modèle de Fuchs-Sondheimer ainsi que diverses interprétations des effets d'interface.

### 7.1.1 Quelques rappels du modèle

Le modèle de Fuchs-Sondheimer [148] repose sur l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation qui compte tenu de la géométrie CIP s'écrit :

$$\pm v_z \frac{\partial f^\pm}{\partial z} - \frac{eE}{m} \frac{\partial f^\pm}{\partial v_x} = -\frac{f^\pm - f_0}{\tau} \quad (7.1)$$

où  $f^+$  caractérise les électrons montants et  $f^-$  les descendants. Ces fonctions de distribution satisfont des conditions de collisions d'interface de type spéculaire qui, pour le cas de la monocouche (figure 6.2), prennent la forme :

$$\begin{cases} f^+(-a, \mathbf{v}) = R_1 f^-(-a, \mathbf{v}) + (1 - R_1) f_0 \\ f^-(a, \mathbf{v}) = R_2 f^+(a, \mathbf{v}) + (1 - R_2) f_0 \end{cases} \quad (7.2)$$

où  $R_1$  et  $R_2$  sont les coefficients de réflexion du bord inférieur et supérieur de la couche que nous supposons différents pour plus de généralité.  $f_0$  est la fonction de distribution d'équilibre.

Ce modèle est ensuite linéarisé autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique. Les fonctions de distribution sont alors décomposées sous la forme :

$$f^\pm = f_0 + \frac{eE\tau}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} g^\pm(z, v_z) \quad (7.3)$$

où les fonctions  $g^\pm$  vérifient les équations différentielles :

$$v_z \frac{\partial g^+}{\partial z} + \frac{g^+}{\tau} = \frac{1}{\tau} \quad -v_z \frac{\partial g^-}{\partial z} + \frac{g^-}{\tau} = \frac{1}{\tau} \quad (7.4)$$

munies des conditions de bords linéarisées :

$$\begin{cases} g^+(-a) = R_1 g^-(-a) \\ g^-(a) = R_2 g^+(a) \end{cases} \quad (7.5)$$

Les composantes hors-équilibre  $g^\pm$  des fonctions de distribution permettent ensuite de calculer les profils de conductivité :

$$\sigma^\pm(z) = \frac{3\sigma_d}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta g^\pm(z, \theta) \quad \sigma(z) = \sigma^+(z) + \sigma^-(z) \quad (7.6)$$

ainsi que la conductivité intégrée  $\sigma$  :

$$\sigma = \frac{3}{4} \sigma_d \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta (g^+(z, \theta) + g^-(z, \theta)) \quad (7.7)$$

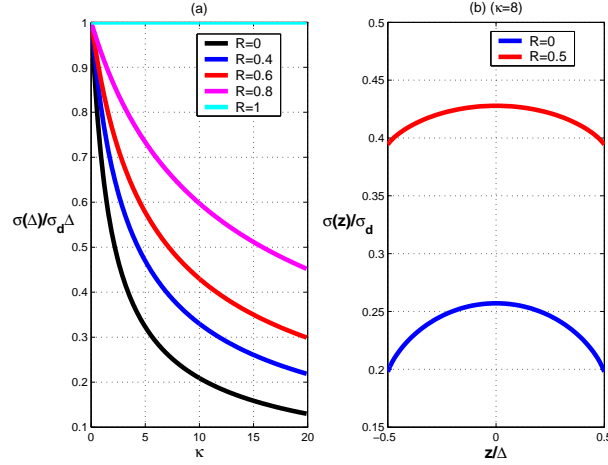


FIGURE 7.1 – Tracé de la conductivité intégrée en fonction du nombre de Knudsen (figure (a)) et du profil de conductivité (figure (b)) du modèle de Fuchs-Sondheimer pour diverses valeurs des coefficients de réflexion ( $R_1 = R_2 = R$ ).

où  $\sigma_d = \frac{e^2 n_0 \tau}{m}$  est la conductivité de Drude de la couche.

La résolution des équations 7.4 et 7.5 conduit alors aux expressions suivantes pour les parties hors-équilibre  $g^\pm$  :

$$g^+(z, \theta) = 1 - \frac{\left( (1 - R_1) + R_1(1 - R_2)e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right)}{1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}}} e^{-\frac{(z+a)}{\ell \cos \theta}} \quad (7.8)$$

$$g^-(z, \theta) = 1 - \frac{\left( (1 - R_2) + R_2(1 - R_1)e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right)}{1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}}} e^{\frac{(z-a)}{\ell \cos \theta}} \quad (7.9)$$

Si l'obtention des fonctions de distributions  $g^\pm$  est aisée, le calcul des profils de conductivité et de conductivité intégrée est chose difficile malgré la forme relativement simple des fonctions de distribution. Cela tient au fait que l'intégration sur l'angle  $\theta$  ne permet pas de faire apparaître de fonctions connues rendant ainsi compliqué l'obtention des expressions des grandeurs macroscopiques. De plus, le calcul des quantités macroscopiques devient de plus en plus compliqué à mesure que le nombre de couche augmente. On constate ainsi que malgré la simplicité du modèle de Fuchs-Sondheimer, le calcul analytique des grandeurs moyennes est compliqué et le recours à des calculs numériques s'avère nécessaire. On trouvera cependant dans la littérature ([148] à [160]) des formules de conductivité approchées qui ne sont généralement valables que pour une gamme d'épaisseurs donnée. Au début de cette thèse, nous avons donc cherché à établir une expression approchée des grandeurs macroscopiques valable pour toutes épaisseurs afin de simplifier l'étude du transport CIP à partir de ce modèle. C'est le but de la méthode variationnelle présentée dans ce chapitre. La figure 7.1 présente les profils de conductivité pour diverses valeurs des coefficients de réflexion pour le cas d'une monocouche.

### 7.1.2 Interprétation des réflexions d'interface

Pour effectuer un calcul variationnel, il faut nécessairement choisir une forme de solution approchée (fonction d'essai) dépendant de paramètres déterminés par le calcul variationnel. Pour comprendre le choix des fonctions d'essai que l'on fera dans la suite, nous analysons l'effet des paramètres d'interface sur la conductivité intégrée dans ce paragraphe.

Si le calcul des grandeurs moyennes à partir des fonctions de distribution 7.8 et 7.9 est difficile, il existe des valeurs particulières des coefficients de réflexion pour lesquels le calcul est aisé.

Ainsi, en l'absence de réflexions d'interface ( $R_1 = R_2 = 0$ ), l'intégration angulaire peut être effectuée et nous obtenons les profils 6.81 à 6.83 du chapitre précédent que nous recopions ici :

$$\frac{\sigma_0(z)}{\sigma_d} = 1 - \frac{3}{4} \left[ \psi_0 \left( \frac{(a+z)}{\ell} \right) + \psi_0 \left( \frac{(a-z)}{\ell} \right) \right] \quad (7.10)$$

$$\frac{\sigma_0(\Delta)}{\sigma_d \Delta} = 1 - \frac{3\kappa}{2} \left[ \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa} \right) \right] \quad (7.11)$$

où l'on a introduit les notations, utiles pour la suite, du chapitre précédent :

$$\psi_0(x) = E_2(x) - E_4(x) \quad \phi_0(x) = E_3(x) - E_4(x) \quad (7.12)$$

Ces profils sont indicés par 0 pour signifier qu'ils correspondent au cas de réflexions nulles.

Le cas opposé de réflectivité parfaite ( $R_1 = R_2 = 1$ ) permet également la détermination des grandeurs moyennes qui s'écrivent simplement :

$$\frac{\sigma_\infty^\pm(z)}{\sigma_d} = \frac{1}{2} \quad \frac{\sigma_\infty(\Delta)}{\sigma_d \Delta} = 1 \quad (7.13)$$

Ces profils coïncident alors avec ceux correspondant à une couche d'épaisseur infinie et on les indicera donc par  $\infty$ . Pour des valeurs quelconques des coefficients de réflexion, les conductivités seront indicées par R.

En observant la figure 7.1 (a), on constate que pour une épaisseur donnée ( $\kappa$  fixé), les deux cas particuliers que l'on sait traiter correspondent au minimum ( $R_1 = R_2 = 0$ ) et au maximum ( $R_1 = R_2 = 1$ ) de conductivité possibles. Ainsi, l'effet des réflexions d'interface est d'augmenter la conductivité de la couche entre les deux valeurs limites définies par  $\sigma_0$  et  $\sigma_\infty$ . On peut alors interpréter cette augmentation de conductivité à l'aide de deux notions que nous présentons maintenant :

- **Effet d'écran** : On constate que pour passer des formules de conductivité 7.11 à 7.13, il suffit de faire disparaître les termes dépendants du nombre de Knudsen dans la formule 7.11 de  $\sigma_0$ . Ces termes sont caractéristiques des effets de bords qui réduisent fortement (par rapport au cas d'épaisseur infinie) le niveau de conductivité de la couche. La présence de réflexions d'interface entraîne donc un effacement progressif de ces termes qui disparaissent complètement pour des interfaces parfaites ( $R_1 = R_2 = 1$ ). On



pourra ainsi constater qu'on peut représenter l'effet des réflexions d'interface sur la conductivité intégrée par la relation empirique :

$$\frac{\sigma_R(\Delta)}{\sigma_d\Delta} = 1 - C_e(R_1, R_2) \frac{3\kappa}{2} \left[ \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa} \right) \right] \quad (7.14)$$

obtenue par habillage de la solution à réflexion nulle. Dans cette expression, la constante  $C_e$ , dépendante des coefficients de réflexion, effectue la balance entre la contribution d'épaisseur infinie et celle d'épaisseur finie. Pour cette raison, on la nommera constante d'écran dans la mesure où elle efface (écrante) les effets d'épaisseur finie. En particulier, elle vérifie nécessairement les propriétés :

$$C_e(R_1 = R_2 = 0) = 1 \quad C_e(R_1 = R_2 = 1) = 0 \quad (7.15)$$

C'est donc une constante positive comprise entre zéro et un. On peut noter que les courbes de conductivité obtenues en exploitant la forme empirique 7.14 pour diverses valeurs de la constante  $C_e$  ont le même comportement en épaisseur que celles correspondant au modèle de Fuchs-Sondheimer. Ainsi, si 7.14 rend compte simplement des réflexions d'interface, toute la difficulté consiste maintenant à déterminer la dépendance de la constante d'écran en fonction des coefficients de réflexion  $R_1$  et  $R_2$ .

- **Knudsen effectif** : On peut également comprendre l'effet des réflexions d'interface à l'aide du concept de nombre de Knudsen effectif. A partir des courbes de conductivités intégrées de la figure 7.2, on constate qu'un même niveau de conductivité est atteint par plusieurs courbes pour différents nombres de Knudsen qui sont de plus en plus grand au fur et à mesure de l'augmentation des coefficients de réflexion. En particulier, avec les notations des courbes 7.2, on constate qu'on peut toujours écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_0(\kappa_0) = \sigma_{R=0.2}(\kappa_1) = \sigma_{R=0.4}(\kappa_2) = \sigma_{R=0.6}(\kappa_3) = \sigma_{R=0.8}(\kappa_4) \\ \text{avec} \quad \kappa_0 < \kappa_1 < \kappa_2 < \kappa_3 < \kappa_4 \end{array} \right. \quad (7.16)$$

et on s'aperçoit, par exemple, que la conductivité d'une couche de nombre de Knudsen  $\kappa_0$  sans réflexions aux bords est la même que celle d'une couche de nombre de Knudsen  $\kappa_1$  plus grand (donc d'épaisseur plus petite) ayant des coefficients de réflexion égaux à 0.2 ou celle d'une couche de Knudsen  $\kappa_4$  encore plus grand (c'est à dire encore moins épaisse) avec des coefficients de réflexion de 0.8 aux bords.

On peut donc interpréter l'effet des réflexions d'interface de la façon suivante : à une couche de nombre de Knudsen  $\kappa$  caractérisée par des coefficients de réflexions non nuls correspond une couche de nombre de Knudsen effectif,  $\kappa_{eff}$ , plus petit dont les coefficients de réflexions sont nuls. Ces deux couches ayant la même conductivité intégrée, on a donc la correspondance :

$$\sigma_R(\kappa) = \sigma_0(\kappa_{eff}) \quad (7.17)$$

où  $\kappa_{eff}$  est une fonction du nombre de Knudsen  $\kappa$  et des coefficients de réflexions  $R_1$  et  $R_2$ . Cette nouvelle forme empirique est très pratique dans

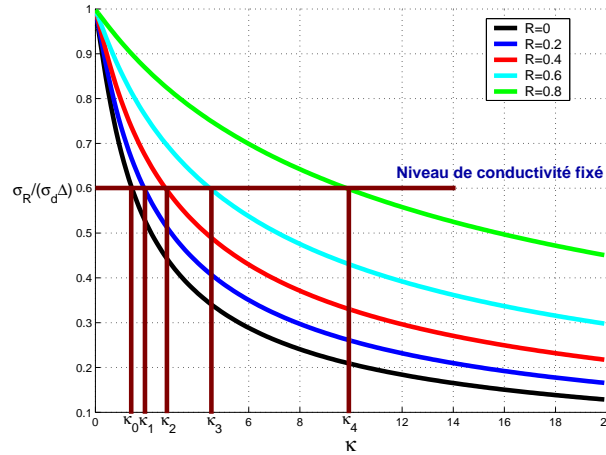


FIGURE 7.2 – Tracé de la conductivité intégrée  $\sigma_R$  en fonction du nombre de Knudsen pour diverses valeurs des coefficients de réflexions ( $R_1 = R_2 = R$ ). On constate que pour un niveau de conductivité donné, il correspond différents nombres de Knudsen qui sont de plus en plus grand au fur et à mesure que la valeur des coefficients de réflexions augmente. En choisissant le cas de réflexion nul comme référence, l'effet des coefficients de réflexion peut être interprété par un habillage du nombre de Knudsen donnant ainsi à la couche une épaisseur effective plus grande. En particulier, il existe toujours un nombre de Knudsen effectif,  $\kappa_{eff}$ , fonction des coefficients de réflexion tel que  $\sigma_R(\kappa) = \sigma_0(\kappa_{eff})$ .

la mesure où l'expression de la conductivité  $\sigma_0$  est parfaitement connue. La difficulté est alors de savoir déterminer effectivement la dépendance de  $\kappa_{eff}$  avec  $\kappa$ ,  $R_1$  et  $R_2$ .

A travers cette étude, nous voyons donc qu'on toujours modéliser l'effet des coefficients de réflexion sur la conductivité par un habillage de la formule de conductivité à coefficients de réflexion nulles par l'introduction de la constante d'écran  $C_e$  et du nombre de Knudsen effectif  $\kappa_{eff}$ . En particulier, nous allons montrer à partir de la méthode variationnelle que la conductivité intégrée est très bien approchée par une expression du type :

$$\frac{\sigma_R}{\sigma_d \Delta} = 1 - C_e \frac{3\kappa_{eff}}{2} \left[ \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) \right] \quad (7.18)$$

qui mélange les deux notions ( $C_e$  et  $\kappa_{eff}$ ) introduites ici et nous donnerons en particulier les expressions des constantes d'écran et du nombre de Knudsen effectif en fonction de  $\kappa$ ,  $R_1$  et  $R_2$ .

## 7.2 Mise sous forme variationnelle

Dans cette partie, nous présentons la mise sous forme variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer. Il faut noter que le problème que l'on cherche à résoudre est assez inédit en soi puisque d'habitude une méthode variationnelle

est employée pour trouver une solution approchée à une équation différentielle que l'on ne sait pas résoudre exactement. Dans notre cas, on pourra constater que les équations différentielles 7.4 sont simples à résoudre et ce sont les conditions de bords 7.5 qui compliquent les fonctions de distribution rendant difficile le calcul des profils de conductivité. Ainsi, il est donc nécessaire de développer une méthode permettant de traiter les conditions de bords variationnellement et donnant accès à des fonctions de distributions permettant un calcul aisé des fonctions de distribution.

Ainsi, nous commençons par montrer que l'on peut interpréter les collisions d'interfaces comme des collisions de volume faisant naturellement apparaître la notion de nombre de Knudsen effectif. A partir de cette transformation, nous introduisons une écriture des fonctions de distribution à l'aide de fonction de green afin d'absorber les conditions d'interface et de ramener l'étude à un problème de transport de volume. Les équations obtenues sont alors mises sous forme variationnelle et nous permettent de construire une solution approchée au modèle de Fuchs-Sondheimer.

### 7.2.1 Réécriture du modèle de Fuchs-Sondheimer

A la base, le calcul de conductivité repose sur le modèle de Fuchs-Sondheimer linéarisé défini par les équations 7.4 et 7.5 dont on rappelle les expressions :

$$\begin{cases} v_z \frac{\partial g^+}{\partial z} + \frac{g^+}{\tau} = \frac{1}{\tau} \\ -v_z \frac{\partial g^-}{\partial z} + \frac{g^-}{\tau} = \frac{1}{\tau} \end{cases} \quad \begin{cases} g^+(-a) = R_1 g^-(-a) \\ g^-(a) = R_2 g^+(a) \end{cases} \quad (7.19)$$

Souhaitant mettre en correspondance le problème à coefficients de réflexion non nuls avec celui de réflexion nulle, peut-on transformer ces équations afin de définir un modèle équivalent pour lequel les conditions de bords seraient toujours celles du modèle de Fuchs-Sondheimer à coefficients de réflexion nul ?

En introduisant la transformation :

$$g^+(z) = \frac{(1 + R_1)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^+(z) + \frac{R_1(1 + R_2)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^-(z) \quad (7.20)$$

$$g^-(z) = \frac{R_2(1 + R_1)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^+(z) + \frac{(1 + R_2)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^-(z) \quad (7.21)$$

on peut alors construire un nouvel ensemble d'équations pour lequel les nouvelles fonctions de distribution  $g_1^+$  et  $g_1^-$  vérifient les conditions de bords du modèle de Fuchs-Sondheimer à coefficients de réflexion nuls. La façon d'établir cette transformation est présentée en annexe E.1 et nous donnons directement le résultat ici. A partir de cette transformation, on montre alors que les nouvelles fonctions de distributions vérifient les équations de volume :

$$v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} + \frac{g_1^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^-}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \quad (7.22)$$

$$-v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{g_1^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^+}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \quad (7.23)$$

munies des conditions de bords

$$g_1^+(-a) = 0 \quad \text{et} \quad g_1^-(a) = 0 \quad (7.24)$$

et dont les temps de relaxation sont définis par :

$$\frac{1}{\tau_{eq}} = \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_1 R_2)}{(1 - R_1 R_2)} \quad \frac{1}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \frac{2R_1(1 + R_2)}{(1 - R_1 R_2)(1 + R_1)} \quad \frac{1}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \frac{2R_2(1 + R_1)}{(1 - R_1 R_2)(1 + R_2)} \quad (7.25)$$

Cette transformation fournit une vision intéressante des coefficients de réflexion. Le modèle de Fuchs-Sondheimer standard décrit la dynamique de deux populations d'électrons, celle montante caractérisée par  $g^+$  et celle descendante décrite par  $g^-$ . Ces deux populations sont découplées en volume car chaque fonction de distribution associée vérifie une équation de Boltzmann autonome et sont couplées aux bords de la couche via les coefficients de réflexions  $R_1$  et  $R_2$ . Dans la nouvelle représentation, les couplages sont inversés. On décrit toujours deux populations électroniques, les montants caractérisés maintenant par  $g_1^+$  et les descendants décrits par  $g_1^-$ , qui sont couplées en volume via les deux temps de relaxation  $\tau_1$  et  $\tau_2$  qui caractérisent des processus de collision dans lesquels la composante  $v_z$  de la vitesse est renversée. Ces populations sont maintenant découplées aux bords et vérifient des conditions de bords similaires à celles du modèle de Fuchs-Sondheimer à coefficients de réflexions nuls.

La nouvelle représentation permet de mettre en lumière deux effets des coefficients de réflexion :

- bien qu'agissant aux bords de la couche, ils affectent les collisions de volume en renormalisant le temps de relaxation  $\tau$  en  $\tau_{eq}$ . On peut alors définir un nouveau nombre de Knudsen,  $\kappa_{eff}$ , par la relation :

$$\kappa_{eff} = \kappa \frac{(1 - R_1 R_2)}{(1 + R_1 R_2)} \quad (7.26)$$

et on constate en particulier que si l'on trace les courbes de conductivité intégrée du modèle de Fuchs-Sondheimer avec réflexions en fonction de ce nombre de Knudsen équivalent (figure 7.3), on tend à superposer toutes les courbes de conductivités sur celle de réflexion nulle. Ce nombre  $\kappa_{eff}$  ne correspond pas exactement au nombre de Knudsen effectif introduit au paragraphe précédent car on constate que les courbes de conductivité intégrées ne se superposent pas exactement sur une unique courbe correspondante à celle de réflexion nulle.

- Ces écarts proviennent du fait que l'on ne tient pas compte du second effet des coefficients de réflexion à savoir les processus de réflexions multiples sur les bords de la couche décrits par les temps de relaxation  $\tau_1$  et  $\tau_2$  et qui modifient la dépendance de  $\kappa_{eff}$  en fonction de  $\kappa$ .

On pourra remarquer que lorsque  $R_1 = R_2 = 0$ , le changement de représentation se réduit à la transformation identité. D'autre part, lorsque  $R_1 = R_2 = 1$  (bords parfaits), les trois temps  $\tau_{eq}$ ,  $\tau_1$  et  $\tau_2$  divergent traduisant simplement le fait que dans ce cas, les fonctions de distribution deviennent uniformes et ne dépendent

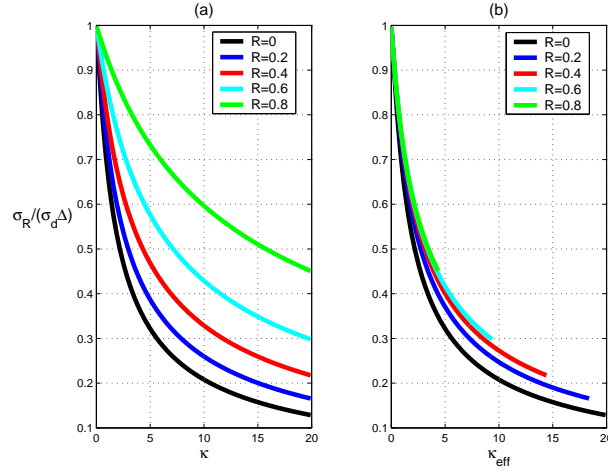


FIGURE 7.3 – Tracé de la conductivité intégrée  $\sigma_R$  en fonction du nombre de Knudsen  $\kappa$  réel (figure (a)) et du nombre de Knudsen effectif (figure (b)). On constate qu'en fonction de  $\kappa_{\text{eff}}$ , les courbes de conductivités tendent à se superposer sur celles de réflexion nulle. Les écarts proviennent du fait que l'expression de  $\kappa_{\text{eff}}$  ne tient pas compte des processus de réflexions multiples sur les bords.

plus de la variable  $z$ .

Ainsi, au cours de ce paragraphe, nous avons été capable de traduire l'effet des coefficients de réflexion non plus dans les conditions de bords mais dans les équations différentielles régissant de nouvelles fonctions de distribution. Il se trouve que résoudre exactement les équations 7.22, 7.23 et 7.24 de la nouvelle représentation n'apporte rien de nouveau dans le sens où on retrouve des fonctions de distribution ayant la même structure que  $g^+$  et  $g^-$  définies par les relations 7.8 et 7.9. Ce calcul est présenté en annexe E.2. Pour pouvoir exploiter la nouvelle représentation, il est nécessaire de développer une méthode de résolution basée sur les fonctions de Green qui est introduite maintenant.

### 7.2.2 Développement itératif des fonctions de distribution

Pour résoudre les équations 7.22, 7.23 et 7.24 de la nouvelle représentation, on décompose les fonctions de distribution  $g_1^+$  et  $g_1^-$  sous la forme :

$$g_1^\pm(z, \theta) = g_C^\pm + g_S^\pm(z, \theta) \quad (7.27)$$

où les composantes  $g_C^\pm$  sont des constantes indépendantes de  $z$  et de  $v_z$  définies par le système d'équations :

$$\begin{cases} \frac{g_C^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_C^-}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \\ \frac{g_C^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_C^+}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \end{cases} \quad (7.28)$$

et les parties  $g_S^\pm$  sont des fonctions de  $z$  et de l'angle  $\theta$  déterminées par le système d'équations différentielles :

$$\begin{cases} v_f \cos \theta \frac{\partial g_S^+}{\partial z} + \frac{g_S^+}{\tau_{eq}} = -\frac{g_S^-}{\tau_1} \\ -v_f \cos \theta \frac{\partial g_S^-}{\partial z} + \frac{g_S^-}{\tau_{eq}} = -\frac{g_S^+}{\tau_2} \end{cases} \quad (7.29)$$

munie des conditions de bords :

$$g_S^+(-a) = -g_C^+ \quad \text{et} \quad g_S^-(a) = -g_C^- \quad (7.30)$$

Les parties constantes  $g_C^\pm$  vérifient un système d'équations algébriques dont les solutions sont :

$$g_C^+ = \frac{\tau_2 \tau_{eq} (\tau_1 - \tau_{eq})}{\tau (\tau_1 \tau_2 - \tau_{eq}^2)} = \frac{1 - R_1}{1 + R_1} \quad (7.31)$$

$$g_C^- = \frac{\tau_1 \tau_{eq} (\tau_2 - \tau_{eq})}{\tau (\tau_1 \tau_2 - \tau_{eq}^2)} = \frac{1 - R_2}{1 + R_2} \quad (7.32)$$

où la deuxième égalité a été obtenue en utilisant les expressions 7.25 de  $\tau_{eq}$ ,  $\tau_1$  et  $\tau_2$  en fonction des coefficients de réflexion. Ces parties constantes absorbent le terme source des équations 7.22 et 7.23 qui ne joue aucun rôle pour ce qui va suivre.

Pour déterminer les composantes inhomogène  $g_s^\pm$ , il est utile d'introduire les fonctions de Green  $G^+$  et  $G^-$  définies par les équations :

$$\pm v_f \cos \theta \frac{\partial G^\pm(z, z')}{\partial z} + \frac{G^\pm(z, z')}{\tau_{eq}} = \delta(z - z') \quad (7.33)$$

On peut alors développer les fonctions  $g_S^\pm$  et  $g_S^\mp$  de façon itérative :

$$g_S^+(z) = g_0^+(z) - \frac{1}{\tau_1} \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \quad (7.34)$$

$$g_S^-(z) = g_0^-(z) - \frac{1}{\tau_2} \int_{-a}^a dz' G^-(z, z') g_S^+(z') \quad (7.35)$$

Où  $g_0^\pm$  sont les solutions des équations découplées :

$$\pm v_f \cos \theta \frac{\partial g_0^\pm}{\partial z} + \frac{g_0^\pm}{\tau_{eq}} = 0 \quad (7.36)$$

Sachant que  $g_S^\pm$  vérifient les conditions de bords 7.30, on impose aux fonctions  $g_0^\pm$  et aux fonctions de Green  $G^\pm$  de vérifier les conditions de bords :

$$g_0^\pm(\mp a) = -g_C^\pm \quad \text{et} \quad G^\pm(\mp a, z') = 0 \quad (7.37)$$

ce qui permet de les définir complètement.

Dans ces conditions, les solutions du problème libre s'écrivent donc :

$$g_0^+(z) = -g_C^+ \exp\left(-\frac{(z+a)}{\ell_{eq} \cos \theta}\right) \quad g_0^-(z) = -g_C^- \exp\left(\frac{(z-a)}{\ell_{eq} \cos \theta}\right) \quad (7.38)$$

Où  $\ell_{eq} = v_f \tau_{eq}$ .

Les fonctions de Green<sup>2</sup> s'expriment sous la forme :

$$G^+(z, z') = \begin{cases} 0 & -a \leq z < z' \\ \frac{1}{v_f \cos \theta} \exp\left(\frac{(z'-z)}{\ell_{eq} \cos \theta}\right) & z' \leq z \leq a \end{cases} \quad (7.39)$$

$$G^-(z, z') = \begin{cases} \frac{1}{v_f \cos \theta} \exp\left(\frac{(z-z')}{\ell_{eq} \cos \theta}\right) & -a \leq z \leq z' \\ 0 & z' < z \leq a \end{cases} \quad (7.40)$$

Les équations 7.34 et 7.35 constituent ce qu'on nommera le développement itératif des fonctions de distributions. Ces équations portent sur les composantes  $g_S^\pm$  des fonctions de distributions et permettent de les séparer en deux sous composantes :

- la partie  $g_0^\pm$  correspondant à la solution des équations en ignorant les termes de couplages dans les équations 7.22 et 7.23. Cette composante contient en fait le premier effet des coefficients de réflexions discuté au paragraphe précédent, à savoir la renormalisation des collisions de volume via le libre parcours moyen  $\ell_{eq}$ . On constate en particulier qu'on sait traiter exactement cette contribution avec cette méthode.
- la partie intégrale qui décrit les processus de réflexions multiples sur les interfaces.

Avec cette méthode de résolution, on est donc capable de gérer exactement la partie renormalisation du libre parcours moyen et on va chercher à approximer la partie collisions multiples sur les bords de la couche. Pour cela, on définit une action permettant de mettre sous forme variationnelle les équations itératives 7.34 et 7.35.

### 7.2.3 Ecriture variationnelle du problème

A partir des équations itératives 7.34 et 7.35, on développe une méthode variationnelle afin de déterminer une approximation des composantes  $g_S^\pm$  des fonctions de distribution  $g_1^+$  et  $g_1^-$ . Pour cela, on introduit l'action :

$$S = \frac{1}{2}S_1 - S_2 + \frac{1}{2}S_3 \quad (7.41)$$

avec

$$S_1 = \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \left[ \tau_1 (g_S^+(z))^2 + \frac{\tau_2}{2} (g_S^-(z))^2 \right] \quad (7.42)$$

$$S_2 = \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \left[ \tau_1 g_0^+(z) g_S^+(z) - \tau_2 g_0^-(z) g_S^-(z) \right] \quad (7.43)$$

$$S_3 = \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \left[ g_S^-(z) \int_{-a}^a dz' G^-(z, z') g_S^+(z') + g_S^+(z) \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \right] \quad (7.44)$$

2. Le détail des calculs pour les fonction de Green est présenté dans l'annexe E.3.

Les équations itératives 7.34 et 7.35 sont obtenues en extrémisant S pour ces deux fonctions :

$$\frac{\delta S(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\delta S(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^-(z, \theta)} = 0 \quad (7.45)$$

par exemple, la minimisation par rapport à  $g_S^+$  donne :

$$\frac{\delta S(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = \frac{1}{2} \frac{\delta S_1(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} - \frac{\delta S_2(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} + \frac{1}{2} \frac{\delta S_3(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} \quad (7.46)$$

avec :

$$\frac{\delta S_1(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = 2 \sin^3 \theta \tau_1 g_S^+ \quad (7.47)$$

$$\frac{\delta S_2(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = \sin^3 \theta \tau_1 g_0^+ \quad (7.48)$$

$$\frac{\delta S_3(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = \sin^3 \theta \left( \int_{-a}^a dz' G^-(z', z) g_S^-(z') + \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \right) \quad (7.49)$$

ou il faut bien noter que dans cette dernière relation, la première intégrale porte sur le premier argument de la fonction de Green  $G^-$ . On montre alors que

$$\int_{-a}^a dz' G^-(z', z) g_S^-(z') = \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \quad (7.50)$$

qui s'obtient en utilisant les expressions 7.39 et 7.40 des fonctions de Green et en écrivant explicitement les intégrales.

Finalement, la dérivée fonctionnelle de S par rapport  $g_S^+$  s'écrit :

$$\frac{\delta S(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = \sin^3 \theta \left( \tau_1 g_S^+ - \tau_1 g_0^+ + \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \right) \quad (7.51)$$

et la condition d'extrémisation fournit bien l'équation itérative 7.34 :

$$\frac{\delta S(g_S^+, g_S^-)}{\delta g_S^+(z, \theta)} = 0 \quad \Rightarrow \quad g_S^+(z) = g_0^+(z) - \frac{1}{\tau_1} \int_{-a}^a dz' G^+(z, z') g_S^-(z') \quad (7.52)$$

Le calcul de la dérivée fonctionnelle de S vis-à-vis de  $g_S^-$  s'effectue de la même façon et la condition d'extrémisation permet de retrouver dans ce cas l'équation itérative 7.35.

L'action 7.41 et les conditions d'extrémisation 7.45 nous fournissent ainsi une méthode d'approximation des fonctions de distribution. Nous avons donc l'outillage nécessaire pour construire une solution approchée du modèle de Fuchs-Sondheimer à coefficients de réflexion non nuls.



### 7.2.4 Solution variationnelle du modèle de Fuchs-Sondheimer

Pour utiliser la méthode variationnelle, il faut choisir une forme pour les fonctions de distribution. Etant donné que les fonctions  $g_0^+$  et  $g_0^-$  (définies par 7.38) contiennent déjà un effet du nombre de Knudsen effectif, nous cherchons donc une solution écrantée de ces fonctions en choisissant comme fonctions d'essais :

$$g_S^+(z) = C^+ g_0^+(z) \quad \text{et} \quad g_S^-(z) = C^- g_0^-(z) \quad (7.53)$$

Dans ces expressions, les coefficients  $C^+$  et  $C^-$  sont des constantes indépendantes de l'angle  $\theta$  et correspondent aux constantes d'écran introduites auparavant.

En injectant ces formes dans l'action S (7.41), on obtient :

$$S = \frac{1}{2} \left( \tau_1 S_{10}^+ (C^+)^2 + \tau_2 S_{10}^- (C^-)^2 \right) - (\tau_1 S_{10}^+ C^+ + \tau_2 S_{10}^- C^-) + C^+ C^- S_{30} \quad (7.54)$$

où on a posé :

$$S_{10}^\pm = \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta (g_0^\pm)^2 = a (g_C^\pm)^2 \kappa_{eff} \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{2}{\kappa_{eff}} \right) \right) \quad (7.55)$$

et

$$\begin{aligned} S_{30} &= \int_{-a}^a dz \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta g_0^\mp(z) \int_{-a}^a dz' G^\mp(z, z') g_0^\pm(z') \\ &= a g_C^+ g_C^- \tau_{eq} \left( \psi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \frac{\kappa_{eff}}{2} \left[ \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \phi_0 \left( \frac{3}{\kappa_{eff}} \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (7.56)$$

où les fonctions  $\psi_0$  et  $\phi_0$  sont définies par 7.12. Le nombre de Knudsen  $\kappa_{eff}$  est donné par 7.26 et les fonctions  $g_C^+$  et  $g_C^-$  sont définies par les relations 7.31 et 7.32.

Pour déterminer les constantes  $C^+$  et  $C^-$ , on utilise alors la condition d'extrémisation, à savoir que les meilleures solutions seront obtenues par les équations :

$$\frac{\partial S}{\partial C^+} = 0 \quad \frac{\partial S}{\partial C^-} = 0 \quad (7.57)$$

Ainsi, en utilisant 7.54, on obtient le système d'équations :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial C^+} = 0 \Rightarrow S_{10}^+ \tau_1 C^+ - S_{01}^+ \tau_1 + C^- S_{30} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial C^-} = 0 \Rightarrow S_{10}^- \tau_2 C^- - S_{01}^- \tau_2 + C^+ S_{30} = 0 \end{cases} \quad (7.58)$$

dont les solutions s'écrivent :

$$C^+ = \frac{\left( 1 - \frac{1}{\tau_1} \frac{S_{30}}{S_{10}^+} \right)}{\left( 1 - \frac{1}{\tau_1 \tau_2} \frac{S_{30}^2}{S_{10}^+ S_{10}^-} \right)} \quad C^- = \frac{\left( 1 - \frac{1}{\tau_2} \frac{S_{30}}{S_{10}^-} \right)}{\left( 1 - \frac{1}{\tau_1 \tau_2} \frac{S_{30}^2}{S_{10}^+ S_{10}^-} \right)} \quad (7.59)$$

On peut simplifier ces expressions en remarquant que le dénominateur vaut quasiment un quelque soit les valeurs des paramètres :

$$\frac{1}{\left( 1 - \frac{1}{\tau_1 \tau_2} \frac{S_{30}^2}{S_{10}^+ S_{10}^-} \right)} \sim 1 \quad \forall \kappa \text{ et } R_1, R_2 \quad (7.60)$$

ce qui signifie que les valeurs des coefficients  $C^+$  et  $C^-$  ne sont fixées que par celles de leurs numérateurs respectifs. Nous retiendrons donc les expressions de  $C^+$  et  $C^-$  :

$$C^+ = 1 - \frac{1}{\tau_1} \frac{S_{30}}{S_{10}^+} = 1 - \frac{g_C^- \tau_{eq}}{g_C^+ \tau_1} \frac{\left[ \psi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \frac{\kappa_{eff}}{2} \left( \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \phi_0 \left( \frac{3}{\kappa_{eff}} \right) \right) \right]}{\kappa_{eff} \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{2}{\kappa_{eff}} \right) \right)} \quad (7.61)$$

$$C^- = 1 - \frac{1}{\tau_2} \frac{S_{30}}{S_{10}^-} = 1 - \frac{g_C^+ \tau_{eq}}{g_C^- \tau_2} \frac{\left[ \psi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \frac{\kappa_{eff}}{2} \left( \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) - \phi_0 \left( \frac{3}{\kappa_{eff}} \right) \right) \right]}{\kappa_{eff} \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{2}{\kappa_{eff}} \right) \right)} \quad (7.62)$$

et permettent d'aboutir aux formes variationnelles des fonctions  $g_1^+$  et  $g_1^-$  :

$$g_1^+(z) = g_C^+ \left( 1 - C^+ e^{-\frac{(z+a)}{\ell_{eq} \cos \theta}} \right) \quad g_1^-(z) = g_C^- \left( 1 - C^- e^{\frac{(z-a)}{\ell_{eq} \cos \theta}} \right) \quad (7.63)$$

qui ressemblent à celles du cas de réflexions nuls avec des paramètres renormalisés.

En utilisant les relations de passage 7.20 et 7.21, on peut déterminer les profils de conductivité ainsi que la conductivité intégrée associés à ces solutions variationnelles :

$$\frac{\sigma_R(z)}{\sigma_d} = \frac{3}{4} \frac{(1+R_1)(1+R_2)}{(1-R_1R_2)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta [g_1^+(z, \theta) + g_1^-(z, \theta)] \quad (7.64)$$

$$\frac{\sigma_R}{\sigma_d \Delta} = \frac{3}{4} \frac{(1+R_1)(1+R_2)}{(1-R_1R_2)} \int_{-a}^a \frac{dz}{2a} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta [g_1^+(z, \theta) + g_1^-(z, \theta)] \quad (7.65)$$

où  $\Delta = 2a$  est l'épaisseur de la couche. Le calcul est alors immédiat puisqu'il est complètement similaire à celui de réflexions nulles. On obtient alors les expressions des conductivités :

$$\frac{\sigma_R(z)}{\sigma_d} = 1 - \frac{3}{4} \left[ C_e^+ \psi_0 \left( \frac{(z+a)}{\ell_{eq}} \right) + C_e^- \psi_0 \left( \frac{(a-z)}{\ell_{eq}} \right) \right] \quad (7.66)$$

$$\frac{\sigma_R}{\sigma_d \Delta} = 1 - \frac{3}{4} C_e \kappa_{eff} \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \right) \right) \quad (7.67)$$

où on a posé :

$$C_e^+ = \frac{(1-R_1)(1+R_2)}{(1-R_1R_2)} C^+ \quad C_e^- = \frac{(1-R_2)(1+R_1)}{(1-R_1R_2)} C^- \quad (7.68)$$

et

$$C_e = C_e^+ + C_e^- \quad (7.69)$$

Les coefficients  $C_e^+$  et  $C_e^-$  sont les constantes d'écran vues dans la représentation standard et tiennent compte du changement de représentation. On constate que ces expressions ne sont rien de plus qu'une renormalisation des expressions 7.10

et 7.11 de réflexions nuls.

On remarque que les constantes d'écran vérifient les propriétés :

$$\begin{aligned} C_e^+ (R_1 = R_1 = 0) &= C_e^- (R_1 = R_1 = 0) = 1 \\ C_e^+ (R_1 = R_1 = 1) &= C_e^- (R_1 = R_1 = 1) = 0 \end{aligned} \tag{7.70}$$

et les expressions variationnelles 7.66 et 7.67 deviennent donc les résultats exacts dans ces deux limites 7.11 et 7.13.

Pour valider la solution variationnelle, nous comparons les courbes de conductivité intégrée (figure 7.4) et de profil de conductivité (figure 7.5) obtenues par les formules du calcul variationnel à celles obtenue par le calcul exact (numérique) du modèle de Fuchs-Sondheimer. On constate que la solution variationnelle fournit une excellente approximation de la conductivité intégrée (figure 7.4) quelques soient les valeurs du nombre de Knudsen et des coefficients de réflexion. Pour les profils de conductivité (figure 7.5), les choses sont tout autre puisqu'on remarque que les profils sont assez différents en particulier près des bords où les écarts sont maximums. Ces écarts peuvent se comprendre en remarquant que les fonctions de distributions variationnelles 7.63 ne vérifient pas les conditions de bords exactes 7.24. Ces fonctions n'appartiennent donc pas au même espace de fonctions que les solutions exactes et on comprend dès lors qu'il peut exister des différences dans les profils en particulier au niveau des bords. Malgré cela, les fonctions exactes et variationnelles fournissent la même conductivité intégrée. On pourrait alors essayer de remédier à ce problème en choisissant des fonctions  $g_1^\pm$  qui s'annulent aux bords. Dans ce cas, les fonctions d'essai appartiennent au même espace de fonctions que les solutions exactes mais il faut comprendre que dans cet espace, la meilleure solution est fournie par la solution exacte. En particulier, plusieurs essais ont montré que les résultats obtenus étaient nettement moins bon que ceux fournis avec les fonctions 7.63. Il semble que ces écarts soient inhérents à la méthode variationnelle qui conduit généralement à de très bonnes approximations pour certaines grandeurs au détriment des autres et ce d'autant plus qu'il est impossible de prédire à l'avance la précision du résultat approché que l'on cherche à obtenir.

### 7.3 Conclusion : origine du modèle collisionnel

Au cours de ce chapitre, nous avons donc développé une méthode variationnelle fournissant une solution approchée pour le modèle de Fuchs-Sondheimer. nous avons ainsi obtenu une solution de très bonne précision pour la conductivité intégrée (grandeur mesurable) par habillage de l'expression à coefficients de réflexion nuls par l'intermédiaire des constantes d'écran et du nombre de Knudsen effectif.

Il est intéressant de remarquer que le modèle alternatif défini par les équations :

$$\begin{cases} v_z \frac{\partial g^+}{\partial z} + \frac{g^+}{\tau} = \frac{1}{\tau} \\ -v_z \frac{\partial g^-}{\partial z} + \frac{g^-}{\tau} = \frac{1}{\tau} \end{cases} \tag{7.71}$$

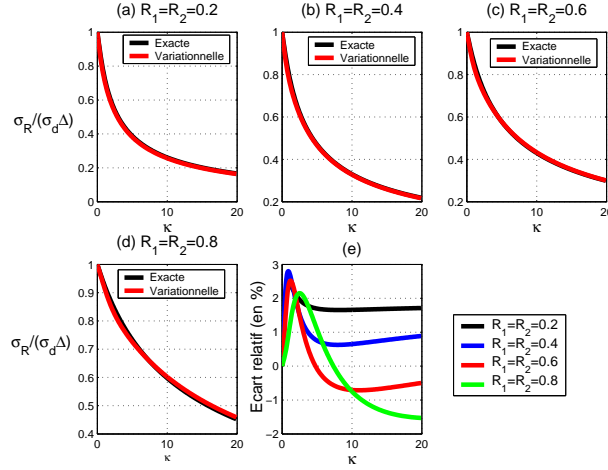


FIGURE 7.4 – Comparaison de la conductivité intégrée exacte (en noire) avec la conductivité variationnelle (en rouge) en fonction du nombre de Knudsen et pour diverses valeurs des coefficients de réflexion (figures (a) à (d)). La solution variationnelle fournit une bonne approximation de la conductivité intégrée pour toutes valeurs des paramètres puisque la solution approchée ne s'écarte jamais de plus de 3% de la solution exacte (figure (e)).

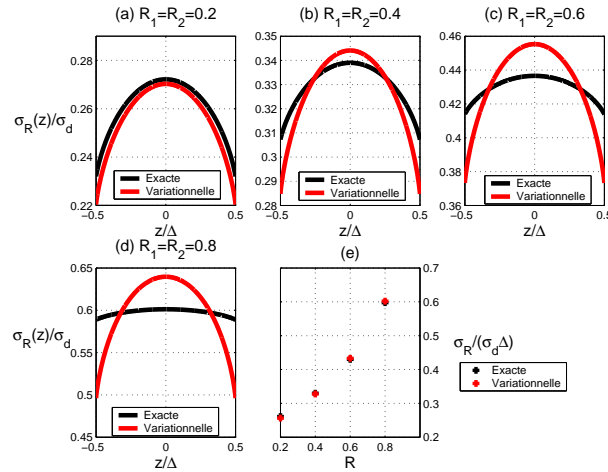


FIGURE 7.5 – Comparaison du profil de conductivité exact (en noir) avec le profil variationnel (en rouge) pour un nombre de Knudsen de 10 (figures (a) à (d)). Bien que les deux profils conduisent à la même conductivité intégrée (figure (e)), les profils de conductivité sont différents surtout proche des bords.

$$g^+(-a) = (1 - \bar{C}^+) \quad g^-(a) = (1 - \bar{C}^-) \quad (7.72)$$

où les constantes  $\bar{C}^+$  et  $\bar{C}^-$  sont reliées aux constantes d'écran variationnelle 7.68 par les relations :

$$\bar{C}^+ = C_e^+ \frac{\kappa_{eq}}{\kappa} \frac{\left(\frac{1}{4} - \phi_2\left(\frac{1}{\kappa_{eq}}\right)\right)}{\left(\frac{1}{4} - \phi_2\left(\frac{1}{\kappa}\right)\right)} \quad (7.73)$$

$$\bar{C}^- = C_e^- \frac{\kappa_{eq}}{\kappa} \frac{\left(\frac{1}{4} - \phi_2\left(\frac{1}{\kappa_{eq}}\right)\right)}{\left(\frac{1}{4} - \phi_2\left(\frac{1}{\kappa}\right)\right)} \quad (7.74)$$

conduit directement à l'expression variationnelle 7.67 de la conductivité intégrée et fournit donc exactement les mêmes courbes de conductivité intégrée que le modèle de Fuchs-Sondheimer. On constate en particulier que ces deux modèles ne diffèrent que par les conditions de bords. Nous avons donc deux modèles de transport qui fournissent exactement la même dépendance en épaisseur de la conductivité. Dans le modèle alternatif, les effets d'interfaces sont encodés dans deux constantes d'écran  $\bar{C}^+$  et  $\bar{C}^-$  dépendant de l'épaisseur et ne sont plus décrit directement par les coefficients de réflexion spéculaires  $R_1$  et  $R_2$  du modèle de Fuchs-Sondheimer.

On constate alors une chose importante : si l'on choisit comme paramètres libres les constantes d'écran  $\bar{C}^+$  et  $\bar{C}^-$ , on obtient donc un modèle de transport soluble à tous les niveaux, c'est à dire qu'on peut aussi bien déterminer les fonctions de distribution que les grandeurs macroscopiques associées. Toutefois, le prix à payer est l'introduction de paramètres d'interface plus délicat à manipuler puisqu'ils dépendent, en toute rigueur, de l'épaisseur ainsi que des vrais paramètres microscopiques caractéristiques de l'interface. Ces paramètres décrivent en réalité un effet moyenné des processus de collision au niveau des interfaces et doivent être interprété comme des grandeurs macroscopiques. Le modèle alternatif introduit donc une certaine incompatibilité d'échelle dans la mesure où la fonction de distribution est une quantité plus microscopique que les nouveaux paramètres d'interface  $\bar{C}^+$  et  $\bar{C}^-$  bien qu'ils permettent un passage aisé entre les grandeurs microscopiques et macroscopiques.

Le modèle collisionnel est en fait né de ce constat et en particulier de l'idée selon laquelle il doit exister une formulation des conditions d'interface rendant toujours possible le passage entre les mondes microscopique et macroscopique et ayant toujours un sens physique lorsqu'on les écrits en termes de grandeurs microscopiques (fonctions de distribution) et de grandeurs macroscopiques (courant, accumulation, conductivité, ...). A l'aide de ce postulat, on s'aperçoit alors que la description des effets d'interface par des intégrales de collision est la seule compatible avec l'équation de Boltzmann (ce qui est assez naturel en soi) et cette description nécessite toujours de chiraliser le transport dans la direction normale aux interfaces. Cette interprétation des résultats de la méthode variationnelle à ainsi conduit à la genèse du modèle collisionnel.

# Chapitre 8

## Synthèse et perspectives

### Sommaire

---

<b>8.1 Synthèse . . . . .</b>	<b>164</b>
<b>8.2 Perspectives . . . . .</b>	<b>169</b>

---

Dans ce chapitre concluant la présentation de ce travail de thèse, nous allons résumer dans la première partie certains aspects du modèle collisionnel afin de montrer qu'il constitue une approche unifiée du transport CIP et CPP. Dans la seconde partie, nous aborderons les perspectives ouvertes par ce travail.

### 8.1 Synthèse

Dans cette partie, nous présentons une synthèse de ce travail de thèse. En mettant en parallèle les développements réalisés pour les structures CIP et CPP, nous montrerons dans la première partie que le modèle collisionnel constitue une approche unifiée du transport pour ces structures. Nous ferons ensuite quelques remarques sur les chiralités. Dans la troisième partie, nous reviendrons sur la structure du courant.

#### 8.1.1 Le modèle collisionnel : une approche unifiée du transport

Au cours des différents chapitres, nous avons abordé le transport dans des structures constituées d'un assemblage de métaux (normaux ou magnétiques) possédant des propriétés caractéristiques de volume (résistivité, libre parcours moyen, ...) différentes. Pour ces systèmes, nous avons fait l'hypothèse de géométrie droite en supposant les interfaces séparant les différentes couches parallèles les unes aux autres et abordé deux configurations de transport : le transport CPP pour lequel le courant circule perpendiculairement aux interfaces et le transport CIP dans lequel le courant circule parallèlement aux interfaces. Pour étudier le transport dans ces structures, nous avons développé le modèle collisionnel que nous résumons maintenant.

Le modèle collisionnel est un modèle de transport semi-classique décrivant les électrons à l'aide de la fonction de distribution  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  fournissant le nombre d'électrons occupant un volume élémentaire autour du point de l'espace des phases  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  à l'instant  $t$ . Celle-ci vérifie l'équation de Boltzmann munie d'une intégrale de collision isotrope :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = -\frac{f}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) \quad (8.1)$$

Pour résoudre cette équation, la fonction de distribution est séparée en deux chiralités  $f^+$  et  $f^-$  suivant que les électrons sont droit ou gauche pour CPP ou montant-descendant pour CIP. Pour chaque chiralité, la fonction de distribution est ensuite linéarisée autour de l'état d'équilibre décrit par une fonction de Fermi-Dirac à température nulle ( $f_0$ ) :

$$f^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_0(\epsilon) + h^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (8.2)$$

Ces fonctions de distributions évoluent alors sous l'action d'un potentiel électrique auto-cohérent fournit par l'équation de Poisson.

Pour compléter ces équations de volume, les effets d'interface sont décrites de manière universelle à l'image du zone de diffusion. Les fonctions de distribution vérifient alors des intégrales de collision d'interface exprimant les fonctions des électrons quittant l'interface en fonction de celles arrivant à celle-ci (figure 8.1). Ces équations prennent la forme générale :

$$f_2^+(\Omega) = 2 \left(\frac{m_1}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{21}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_1^+(\Omega', v') + 2 \left(\frac{m_2}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{22}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_2^-(\Omega', v') \quad (8.3)$$

$$f_1^-(\Omega) = 2 \left(\frac{m_1}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{11}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_1^+(\Omega', v') + 2 \left(\frac{m_2}{h}\right)^3 \int d\mathbf{v}' W_{12}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_2^-(\Omega', v') \quad (8.4)$$

et tiennent compte de tous les changements de direction possibles de la vitesse.

Cette description microscopique du transport est applicable pour les deux types de structures CIP et CPP.

L'avancée majeure de ce modèle repose sur l'utilisation de bases de polynômes orthogonaux pour extraire de la fonction de distribution l'information relative à sa dépendance envers les deux angles  $\theta$  et  $\varphi$  caractéristiques de la vitesse. En particulier, vis-à-vis de l'angle  $\varphi$ , les fonctions de distribution et les taux de transitions sont toujours décomposés sur la base des polynômes de Tchebychev :

$$h^{\pm}(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = \sum_{m=0}^{+\infty} h_m^{\pm}(\mathbf{r}, \theta) T_m\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) \quad (8.5)$$

$$W(\Omega, \Omega') = \sum_{m=0}^{+\infty} W_m(\theta, \theta') T_m\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) T_m\left(\cos \frac{\varphi'}{2}\right) \quad (8.6)$$

et la configuration de transport sélectionne alors une seule composante de ces développements universels :

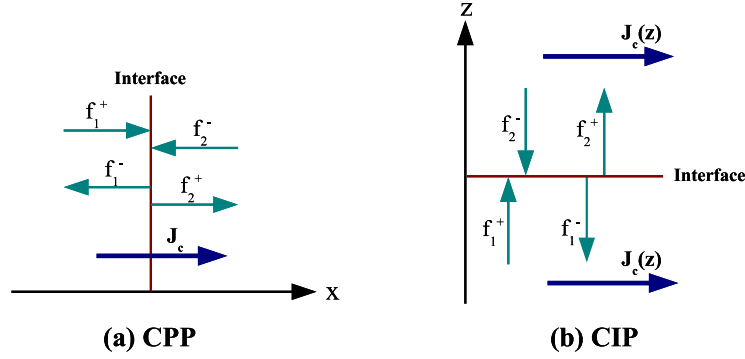


FIGURE 8.1 – Représentation des collisions d'interface pour les deux types de structures. Quelque soit la configuration de transport, les interfaces convertissent les électrons arrivant en électrons sortant.

- **Pour le transport CPP**, la fonction de distribution est isotrope en  $\varphi$  et seule les composantes d'ordre zéro  $h_0^\pm(z, \theta)$  sont utiles pour comprendre le transport. Celles-ci vérifient alors l'équation de Boltzmann :

$$\pm v \cos \theta \frac{\partial h_0^\pm}{\partial x} \mp ev \cos \theta E(x) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{h_0^\pm}{\tau} + \frac{1}{2\tau} \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' (h_0^+(x, \theta') + h_0^-(x, \theta')) \quad (8.7)$$

où on a utilisé la convention  $v_x = v \cos \theta$ . La résolution de ces deux équations nécessite alors la décomposition de ces composantes sur les polynômes de Legendre décalés :

$$h_0(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} h_{0n}(x) \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (8.8)$$

Concernant les taux de transition, la projection sélectionne alors automatiquement la composante d'ordre zéro ( $W_0(\theta, \theta')$ ) puisque seule la composante d'ordre zéro des fonctions de distribution est non nulle. Ces taux sont alors décomposés sur la base de polynômes de Legendre décalés.

- **Pour le transport CIP**, la fonction de distribution est anisotrope en  $\varphi$  et seule les composantes d'ordre deux  $h_2^\pm(z, \theta)$  sont utiles pour comprendre le transport. Celles-ci vérifient l'équation de Boltzmann :

$$\pm v \cos \theta \frac{\partial h_2^\pm}{\partial z} - evE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{h_2^\pm}{\tau} \quad (8.9)$$

où on a utilisé la convention  $v_z = v \cos \theta$  et  $v_x = v \sin \theta \cos \varphi$ . La résolution est directe et ne nécessite donc pas l'utilisation d'une base de polynômes supplémentaire. Pour cette configuration, la projection sélectionne alors la composante d'ordre deux ( $W_2(\theta, \theta')$ ) des taux de transitions qui sont alors décomposés sur la base de polynômes de Legendre décalés.



Nous voyons ainsi, par la méthodologie employée, que le modèle collisionnel constitue une approche unifiée du transport dans les structures CIP et CPP. Ce formalisme permet donc de comprendre les propriétés de transport à partir d'un jeu d'équations universelles dont la géométrie de chaque configuration extrait de celles-ci une partie différente de l'information. Grâce à ce modèle, le passage entre les descriptions microscopiques et macroscopiques est facilité ce qui nous a permis de développer un modèle de transport balistique-diffusif pour les structures CPP et d'obtenir des expressions analytiques pour les profils de conductivité directement exploitables pour les structures CIP.

### 8.1.2 Les Chiralités

Dans le modèle collisionnel, les chiralités jouent un rôle essentiel et sont indispensables pour décrire correctement les effets d'interfaces en termes de collision. De plus, Elles permettent d'extraire une bonne partie de l'information de l'équation (problème de Milne) et permettent de concilier naturellement, pour les structures CPP, les résultats issus du formalisme de Landauer-Buttiker du régime incohérent avec ceux issus du modèle dérive-diffusion.

Remarquons que ce découpage de l'espace des phases peut être augmenté en introduisant des fonctions de distribution définies sur des intervalles angulaires encore plus réduit (par exemple  $[0, \frac{\pi}{4}]$  si l'on redécoupe en deux l'intervalle  $[0, \frac{\pi}{2}]$ ). Cette procédure a plusieurs répercussions :

- On augmente alors le nombre de fonction distribution à déterminer puisque N découpage de l'intervalle  $[0, \pi]$  introduit 2N fonctions de distribution. Ceci est à rapprocher du formalisme de Landauer-Buttiker dans lequel on distingue plusieurs types de canaux.
- Etant associé à la variable  $\theta$ , le découpage nécessite de faire évoluer simultanément les polynômes de Legendre et de les transformer en polynômes multi-décalés.
- L'intérêt d'un tel découpage est d'affiner la résolution de l'équation de Boltzmann (du moins pour CPP) puisque l'introduction de chiralités multiples va chercher des effets de plus en plus fins contenus dans cette équation. En particulier, nous avons montré qu'en tronquant le développement de la fonction de distribution à l'ordre un dans la base chirale, nous avons accès à une approximation de toutes les composantes dans la base non chirale. Ainsi, en multipliant par deux les chiralités et en tronquant toujours la résolution de l'équation de Boltzmann à l'ordre un dans la base des polynômes de Legendre doublement décalés, nous avons ainsi accès à une approximation de toutes les composantes de la base chirales et donc une meilleure approximation de celles de la base non chirale.

De façon pratique, l'introduction de chiralités multiples permet de résoudre l'équation de Boltzmann de plus en plus finement en restant constamment à une approximation d'ordre un dans la base de polynômes adaptée. Notons que cette procédure de multi-chiralisation nécessite d'affiner également la description des effets d'interfaces en introduisant des taux de transitions pour chaque chiralités possibles et autant d'équations de collision qu'il y a de chiralités quittant l'interface.

Concernant ce travail de thèse, la chiralisation simple suffit amplement dans la mesure où nous avons retenu une intégrale de collision isotrope qui ne possède donc pas de structure angulaire. La chiralisation multiple peut jouer un rôle fondamental dès lors que l'intégrale de collision devient fortement anisotrope et nécessite des développements angulaires élevés de la fonction de distribution.

### 8.1.3 Courant CIP et Courant CPP

L'étude du transport dans les structures CPP et CIP a permis de montrer que le courant s'écrit toujours comme la dérivée d'une certaine quantité : le potentiel électrochimique généralisé  $\Phi$  (chapitre 2, formule 2.110) pour le transport CPP et la composante transverse  $\Pi_{xz}$  du tenseur des pressions pour le transport CIP (chapitre 6 relation 6.132).

De façon générale, quel que soit le type de structure, le courant s'écrit toujours comme la somme d'une loi d'Ohm locale et de la dérivée d'une des composantes du tenseur des pressions :

– **Pour CPP** :

$$J_x = \sigma_d E(x) - \tau \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} \quad (8.10)$$

où l'on a introduit la composante diagonale du tenseur des pressions :

$$\Pi_{xx} = -2e \left( \frac{m}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v} v_x^2 h \quad (8.11)$$

où  $h$  désigne la partie hors-équilibre de la fonction de distribution. On montre alors que cette composante peut être écrite sous la forme :

$$\Pi_{xx} = \frac{v_f^2}{3} n(x) + v_f (J_1^+ - J_1^-) \quad (8.12)$$

où  $n(x)$  désigne le profil d'accumulation et  $J_1^\pm$  les composantes anisotropes du courant. La manipulation des équations de transport 2.71 à 2.75 permet alors d'écrire la différence des courants anisotropes en fonction du potentiel électrochimique  $\bar{\mu}$  :

$$J_1^+ - J_1^- = -\sigma_d \frac{\ell}{12} \frac{\partial^2 \bar{\mu}}{\partial x^2} \quad (8.13)$$

permettant alors d'introduire le potentiel électrochimique généralisé  $\Phi$ .

– **Pour CIP** :

$$J_x(z) = \sigma_d E - \tau \frac{\partial \Pi_{xz}}{\partial z} \quad (8.14)$$

où l'on a introduit la composante non diagonale du tenseur des pressions :

$$\Pi_{xz} = -2e \left( \frac{m}{h} \right)^3 \int d\mathbf{v} v_x v_z h \quad (8.15)$$

Ces relations sont très générales et peuvent être obtenues par intégration formelle de l'équation de Boltzmann. Cette relation entre courant et pression n'est pas étonnante puisque le tenseur  $\Pi$  représente par définition le flux du courant. Le courant s'écrit donc toujours en termes des mêmes quantités physiques mettant ainsi plus d'unité entre les structures CIP et CPP.

## 8.2 Perspectives

Pour terminer, nous présentons quelques extensions possibles de ce travail de thèse.

- **Traitement des vannes de spin non colinéaires** : le formalisme du modèle collisionnel peut être adapté à l'étude des vannes de spin non colinéaire. Pour ces systèmes, la fonction de distribution devient matricielle et l'équation de Boltzmann doit être modifiée. Au cours de cette thèse, j'ai travaillé à mieux comprendre la dérivation de l'équation de Boltzmann à partir des équations de Kadanoff-Baym de la mécanique quantique. Ce travail a permis de mettre en évidence des hypothèses simples permettant une certaine systématique dans la dérivation de l'équation de Boltzmann. Grâce à cette procédure, l'adaptation du modèle collisionnel aux vannes de spin non colinéaires devient aisé et en cours de réalisation.
- **Le transport bidimensionnel** : Le traitement des structures présentant des effets d'épaisseurs dans deux directions (structures mixtes CPP-CIP) est maintenant plus abordable. En effet, A travers ce travail, nous voyons que la construction d'un modèle de transport à partir de l'équation de Boltzmann est facilité par le choix de la bonne base de polynômes. Pour traiter des structures bidimensionnelles, il faut alors chiraliser le transport simultanément dans deux directions. La difficulté essentielle provient du fait que les polynômes que nous avons utilisé pour traiter les structures CIP et CPP ne suffisent plus. Il faut alors se tourner vers les harmoniques sphériques pour pouvoir traiter ce type de structure et la difficulté réside alors dans la construction d'harmoniques sphériques chirales ce qui est moins simple que la transformation des polynômes de Legendre décalés. Une fois ce verrou mathématiques éliminé, le développement d'un modèle de transport bidimensionnel sera alors à portée. En particulier, cela permettra de combler certaines lacunes persistantes encore pour les structures CIP.
- **Application à d'autres types de transport** : nous avons vu que le modèle collisionnel pouvait être adapté au transport de la lumière dans les milieux diffusants. Ainsi, il reste à explorer les conséquences du modèle de transport développé sur le transport lumineux. L'application du modèle collisionnel au transport thermique est une chose intéressante puisque une application simple à l'effet Seebeck a permis de montrer qu'on pouvait comprendre le transport thermique sans introduire la notion de température locale dont la signification n'est d'ailleurs pas très claire en régime hors-équilibre. L'étude de la propagation de particules classiques (comme les ions en solution) à partir du modèle collisionnel peut également être envisagée. La nouveauté provient alors du fait que la répartition d'équilibre est maintenant décrite par une Maxwellienne ce qui nécessite l'emploi d'autres bases de polynômes, comme les polynômes d'Hermite, pour résoudre l'équation de Boltzmann. L'introduction des chiralités à la dérivation de l'hydrodynamique à partir de l'équation de Boltzmann peut être une chose utile. En effet, les chiralités étant associées aux effets de bords, on pourrait alors développer une hydrodynamique susceptible de

mieux décrire les écoulements à basse dimension et contenant plus d'informations issues de l'équation de Boltzmann. Pour réaliser une telle chose, il est nécessaire de conserver la structure bilinéaire de l'intégrale de collision.

- **Extension au régime alternatif** : Dans cette thèse, nous avons regardé uniquement un régime de transport continu. Concernant les structures CPP, l'extension au régime alternatif a été partiellement effectuée pour le transport pure de charge. Pour ce cas, la résolution de l'équation de Boltzmann chirale à fréquence finie a été réalisée. La difficulté principale de ce régime réside dans l'écriture correcte des collisions d'interface. En effet, à fréquence finie, le courant de charge n'est plus une quantité conservée et il faut tenir compte du courant de déplacement. Les taux de collisions ne doivent donc plus satisfaire la loi de conservation du courant à fréquence finie. Nous n'avons pas trouvé pour le moment de généralisation satisfaisante pour ces conditions permettant en particulier de restituer à fréquence nulle la conservation du courant au niveau de l'interface.

## Annexe A

# Projection de l'équation de Boltzmann

### A.1 Projection sur les polynômes de Legendre standards

Pour le transport CPP, l'équation de Boltzmann en l'absence de chiralités prend la forme adimensionnée :

$$\cos \theta \frac{\partial g}{\partial X} + \cos \theta \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} = -g + \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' g(X, \theta') \quad (\text{A.1})$$

Dans ce cas, la base adaptée pour la décomposition de la fonction de distribution est celle des polynômes de Legendre ordinaires :

$$g(X, \theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} g_\ell(X) P_\ell(\cos \theta) \quad (\text{A.2})$$

où les polynômes  $P_\ell$  vérifient les relations d'orthogonalité et de récurrence utiles pour la suite :

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) = \frac{2}{(2\ell+1)} \delta_{\ell,\ell'} \quad (\text{A.3})$$

et

$$P_1 P_\ell = \frac{(\ell+1)}{(2\ell+1)} P_{\ell+1} + \frac{\ell}{(2\ell+1)} P_{\ell-1} \quad (\text{A.4})$$

En remarquant que  $P_1 = \cos \theta$  et que l'intégrale de collision ne sélectionne que la composante d'ordre zéro de la fonction de distribution, l'équation A.1 se met alors sous la forme :

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{\partial g_\ell}{\partial X} \left[ \frac{(\ell+1)}{(2\ell+1)} P_{\ell+1} + \frac{\ell}{(2\ell+1)} P_{\ell-1} \right] + P_1 \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} = - \sum_{\ell=0}^{+\infty} g_\ell P_\ell + g_0 \quad (\text{A.5})$$

dans laquelle on a utilisé la relation de récurrence A.4.

En projetant ensuite cette dernière équation sur le polynôme de Legendre  $P_m$  (en utilisant la relation d'orthogonalité A.3), on obtient :

$$\begin{aligned} & \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{\partial g_\ell}{\partial X} \left[ \frac{2m}{(2m+1)(2m-1)} \delta_{\ell,m-1} + \frac{2(m+1)}{(2m+3)(2m+1)} \delta_{\ell,m+1} \right] + \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} \delta_{m,1} \\ &= - \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{2}{(2m+1)} g_\ell \delta_{\ell,m} + 2g_0 \delta_{m,0} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

qui en spécifiant des valeurs de  $m$  fournit un ensemble infini d'équations différentielles couplées :

-  $m = 0$  :

$$\frac{\partial g_1}{\partial X} = 0 \quad (\text{A.7})$$

-  $m = 1$  :

$$\frac{\partial g_0}{\partial X} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial X} + \frac{2}{5} \frac{\partial g_2}{\partial X} = -g_1 \quad (\text{A.8})$$

-  $m \geq 2$  :

$$\frac{m}{(2m-1)} \frac{\partial g_{m-1}}{\partial X} + \frac{(m+1)}{(2m+3)} \frac{\partial g_{m+1}}{\partial X} = -g_m \quad (\text{A.9})$$

## A.2 Projection sur les polynômes chiraux

### A.2.1 Projection

Les équations 2.44 et 2.47 étant couplées, il est alors judicieux de définir d'autres quantités permettant de résoudre chacune des équations prises séparément. En particulier, on introduit les fonctions :

$$\bar{g}^\pm(X, \theta) = g^\pm(X, \theta) + \bar{V}(X) \quad (\text{A.10})$$

et on définit les sommes et les différences de ces nouvelles fonctions :

$$S(X, \theta) = \bar{g}^+(X, \theta) + \bar{g}^-(X, \theta) \quad D(X, \theta) = \bar{g}^+(X, \theta) - \bar{g}^-(X, \theta) \quad (\text{A.11})$$

qui permettent de réécrire les équations 2.44 et 2.47 sous la forme :

$$\cos \theta \frac{\partial D}{\partial X} = -S + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' S(X, \theta') \quad (\text{A.12})$$

$$\cos \theta \frac{\partial S}{\partial X} = -D \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x^2} - \eta^2 \bar{V} = -\frac{\eta^2}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta S(X, \theta) \quad (\text{A.14})$$

On décompose alors les fonctions  $S$  et  $D$  sur la base des polynômes de Legendre décalés :

$$S(X, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} S_n(X) P_n(\cos \theta) \quad D(X, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} D_n(X) P_n(\cos \theta) \quad (\text{A.15})$$

qui une fois connue leurs composantes permettent d'obtenir celles du développement 2.57 par les relations :

$$g_m^+ = \frac{1}{2}(S_m + D_m) - \mu\delta_{m,0} \quad g_m^- = \frac{1}{2}(S_m - D_m) - \mu\delta_{m,0} \quad (\text{A.16})$$

On constate alors que pour déterminer les nouvelles fonctions S et D, il suffit de résoudre uniquement les équations de Boltzmann permettant ensuite d'obtenir le potentiel électrique. Pour obtenir des équations sur les composantes  $S_m$  et  $D_m$ , il faut projeter les équations A.12 et A.13 comme suit :

– On insère les développements de S et D dans les équations A.12 et A.13 :

$$\frac{1}{2}(P_1 + P_0) \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial D_n}{\partial X} P_n = - \sum_{n=0}^{+\infty} S_n P_n + S_0 \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{1}{2}(P_1 + P_0) \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial S_n}{\partial X} P_n = - \sum_{n=0}^{+\infty} D_n P_n \quad (\text{A.18})$$

où on a utilisé la décomposition du cosinus sur les polynômes orthogonaux.

– On multiplie par  $P_m$  et on projette :

$$\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial D_n}{\partial X} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta (P_m P_1 P_n + P_m P_n) = - \sum_{n=0}^{+\infty} S_n \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta P_m P_n + S_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta P_m \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial S_n}{\partial X} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta (P_m P_1 P_n + P_m P_n) = - \sum_{n=0}^{+\infty} D_n \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta P_m P_n \quad (\text{A.20})$$

On a utilisé la fait que  $P_0 = 1$ .

– Utilisant les propriétés des polynômes, on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial D_n}{\partial X} \left( \frac{(n+1)}{(2n+1)(2n+3)} \delta_{m,n+1} + \frac{n}{(2n+1)(2n-1)} \delta_{m,n-1} + \frac{\delta_{m,n}}{(2n+1)} \right) \\ &= - \sum_{n=0}^{+\infty} S_n \frac{\delta_{m,n}}{(2n+1)} + S_0 \delta_{m,0} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\partial S_n}{\partial X} \left( \frac{(n+1)}{(2n+1)(2n+3)} \delta_{m,n+1} + \frac{n}{(2n+1)(2n-1)} \delta_{m,n-1} + \frac{\delta_{m,n}}{(2n+1)} \right) \\ &= - \sum_{n=0}^{+\infty} D_n \frac{\delta_{m,n}}{(2n+1)} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

– Il suffit alors de spécifier les valeurs de m pour obtenir un ensemble d'équations différentielles couplées pour les fonctions  $S_n$  et  $D_n$  :

–  $m = 0$  :

$$\frac{1}{3} \frac{\partial D_1}{\partial X} + \frac{\partial D_0}{\partial X} = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial S_1}{\partial X} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_0}{\partial X} = -D_0 \quad (\text{A.24})$$

–  $m \geq 1$  :

$$\frac{m}{2(2m-1)} \frac{\partial D_{m-1}}{\partial X} + \frac{(m+1)}{2(2m+3)} \frac{\partial D_{m+1}}{\partial X} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_m}{\partial X} = -S_m \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{m}{2(2m-1)} \frac{\partial S_{m-1}}{\partial X} + \frac{(m+1)}{2(2m+3)} \frac{\partial S_{m+1}}{\partial X} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_m}{\partial X} = -D_m \quad (\text{A.26})$$

L'équation de Poisson A.14 devient alors :

$$\frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x^2} - \eta^2 \bar{V} = -\frac{\eta^2}{2} S_0(X) \quad (\text{A.27})$$

### A.2.2 Solution à l'ordre un

Pour résoudre les équations A.23 à A.26, on ne conserve que les termes d'ordre zéro et un et on néglige donc tous les termes d'ordre supérieur ou égale à deux. Ainsi, les équations A.23 à A.26 fournissent le système plus simple :

$$\frac{1}{6} \frac{\partial S_1}{\partial X} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_0}{\partial X} = -D_0 \quad (\text{A.28})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial D_1}{\partial X} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_0}{\partial X} = 0 \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial S_0}{\partial X} + \frac{1}{6} \frac{\partial S_1}{\partial X} + \frac{1}{3} D_1 = 0 \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial D_0}{\partial X} + \frac{1}{6} \frac{\partial D_1}{\partial X} + \frac{1}{3} S_1 = 0 \quad (\text{A.31})$$

En combinant judicieusement ces équations, on peut obtenir quatre nouvelles équations ne faisant apparaître qu'une seule dérivée de chaque fonction dans chacune d'elles :

$$\frac{\partial S_0}{\partial X} = D_1 - 3D_0 \quad (\text{A.32})$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial X} = 3D_0 - 3D_1 \quad (\text{A.33})$$

$$\frac{\partial D_0}{\partial X} = S_1 \quad (\text{A.34})$$

$$\frac{\partial D_1}{\partial X} = -3S_1 \quad (\text{A.35})$$

En dérivant A.33 par rapport à X et en utilisant A.34 et A.35, on obtient alors une équation fermée sur  $S_1$  :

$$\boxed{\frac{\partial^2 S_1}{\partial X^2} - 12S_1 = 0} \quad (\text{A.36})$$

On déduit alors que  $S_1$  est de la forme :

$$S_1(X) = \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \quad (\text{A.37})$$



En utilisant les équations A.32, A.34 et A.35, on obtient alors :

$$D_1(X) = \lambda_3 + \frac{3}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} - \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.38})$$

$$D_0(X) = \lambda_4 - \frac{1}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} - \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.39})$$

$$S_0(X) = \lambda_5 + (\lambda_3 - 3\lambda_4)X - \frac{1}{2} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.40})$$

On constate que pour vérifier l'équation A.33, il faut imposer la relation :

$$\lambda_3 = \lambda_4 \quad (\text{A.41})$$

Les solutions s'écrivent finalement :

$$D_1(X) = \lambda_3 + \frac{3}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} - \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.42})$$

$$D_0(X) = \lambda_3 - \frac{1}{\sqrt{12}} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} - \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.43})$$

$$S_0(X) = \lambda_5 - 2\lambda_3 X - \frac{1}{2} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.44})$$

Le potentiel électrique  $\bar{V}$  s'obtient alors en résolvant l'équation A.27 qui s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial X^2} - \eta^2 \bar{V} = -\frac{\eta^2}{2} \left( \lambda_5 - 2\lambda_3 X - \frac{1}{2} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \right) \quad (\text{A.45})$$

et dont la solution est de la forme :

$$\bar{V}(X) = \beta_1 e^{-\eta X} + \beta_2 e^{\eta X} + \frac{1}{2} (\lambda_5 - 2\lambda_3 X) + \frac{\eta^2}{4(12 - \eta^2)} \left( \lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}} \right) \quad (\text{A.46})$$

Connaissant les expressions de  $S_{0/1}$ ,  $D_{0/1}$  et  $\bar{V}$ , on peut en déduire celles des fonctions  $g_{0/1}^\pm$  en utilisant les relations A.16 :

$$g_1^+(X) = \frac{1}{2} \left[ \lambda_3 + \lambda_1 \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{X\sqrt{12}} \right] \quad (\text{A.47})$$

$$g_1^-(X) = \frac{1}{2} \left[ -\lambda_3 + \lambda_1 \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) e^{X\sqrt{12}} \right] \quad (\text{A.48})$$

$$g_0^+(X) = \frac{\lambda_3}{2} - \lambda_1 \left[ \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12 - \eta^2)} \right] e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 \left[ \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12 - \eta^2)} \right] e^{X\sqrt{12}} - \beta_1 e^{-\eta X} - \beta_2 e^{\eta X} \quad (\text{A.49})$$

$$g_0^-(X) = -\frac{\lambda_3}{2} + \lambda_1 \left[ \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12 - \eta^2)} \right] e^{-X\sqrt{12}} - \lambda_2 \left[ \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12 - \eta^2)} \right] e^{X\sqrt{12}} - \beta_1 e^{-\eta X} - \beta_2 e^{\eta X} \quad (\text{A.50})$$

$$\bar{V}(X) = \beta_1 e^{-\eta X} + \beta_2 e^{\eta X} + \frac{1}{2}(\lambda_5 - 2\lambda_3 X) + \frac{\eta^2}{4(12 - \eta^2)} (\lambda_1 e^{-X\sqrt{12}} + \lambda_2 e^{X\sqrt{12}}) \quad (\text{A.51})$$

A partir de ces expressions, on en déduit que le courant de charge est relié à la constante  $\lambda_3$  :

$$J_c = \frac{1}{2} e n_0 v_f \lambda_3 \quad (\text{A.52})$$

qui permet ainsi d'exprimer l'inconnue  $\lambda_3$  en fonction du courant total. Etant en régime linéaire, toutes les grandeurs seront proportionnelles au courant. Ainsi, on factorise toutes les expressions par  $\lambda_3$  ce qui revient à normaliser les constantes d'intégration. En utilisant ces résultats, on obtient alors les expressions des grandeurs macroscopiques du paragraphe 2.2.5.

# Annexe B

## Conditions d'interface

Cette annexe contient l'établissement des règles de somme ainsi que le passage à des équations macroscopiques pour les conditions d'interface présentées dans le second chapitre.

### B.1 Dérivation des règles de somme

#### Conservation des particules entrantes et sortantes

La loi de conservation des particules entrantes et sortantes s'écrit :

$$n_R^+ + n_L^- = n_L^+ + n_R^- \quad (\text{B.1})$$

La densité de particule s'obtient en faisant la moyenne de la fonction de distribution par rapport à la vitesse :

$$n_{L,R}^\pm = -2e \left(\frac{m}{h}\right)^3 \int d^3\vec{v} f_{L,R}^\pm = -e \int_{E_{0L,R}}^{+\infty} dE \rho_{L,R}^\pm \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta f_{L,R}^\pm(\theta, v) \quad (\text{B.2})$$

Ainsi, en multipliant par la charge électrique et en sommant 2.130 et 2.131, l'intégration sur la vitesse conduit alors à :

$$\begin{aligned} n_R^+ + n_L^- = & -e \int_{E_{0L}}^{+\infty} dE \rho_L^+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+ [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] f_L^+(\theta', v) + \\ & -e \int_{E_{0R}}^{+\infty} dE \rho_R^- \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^- [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] f_R^-(\theta', v) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

dont on constate que pour la conservation des particules soit assurée, il suffit d'imposer la règle de somme :

$$\rho_L^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad (\text{B.4})$$

$$\rho_R^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad (\text{B.5})$$

### Conservation du courant

La continuité du courant s'écrit :

$$J_R^+ + J_R^- = J_L^+ + J_L^- \quad \Rightarrow \quad J_R^+ - J_L^- = J_L^+ - J_R^- \quad (\text{B.6})$$

où chaque contribution du courant s'obtient par la relation :

$$J_{L,R}^\pm = -e \int_{E_{0L,R}}^{+\infty} dE \rho_{L,R}^\pm \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta (\pm v) \sin \theta \cos \theta f_{L,R}^\pm(\theta, v) \quad (\text{B.7})$$

En multipliant 2.130 et 2.131 par la charge et la vitesse, puis en sommant et en intégrant les deux équations, on obtient :

$$\begin{aligned} J_R^+ - J_L^- &= -e \int_{E_{0L}}^{+\infty} dE \rho_L^+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+ v \cos \theta [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] f_L^+(\theta', v) - \\ &- e \int_{E_{0R}}^{+\infty} dE \rho_R^- \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^- (-v) \cos \theta [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] f_R^-(\theta', v) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

dont on s'aperçoit que la conservation du courant est assurée si on impose la seconde règle de somme :

$$\rho_L^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{LL}(\theta, \theta', E) + W_{LR}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \quad (\text{B.9})$$

$$\rho_R^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{RR}(\theta, \theta', E) + W_{RL}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \quad (\text{B.10})$$

### Compatibilité avec l'état d'équilibre

Pour obtenir cette règle de somme, il suffit d'imposer que la fonction de distribution est isotrope en vitesse et identique de part et d'autre de l'interface :

$$f_0(E) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_L^+(E) W_{Lj}(\theta, \theta', E) f_0(E) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_R^-(E) W_{Rj}(\theta, \theta', E) f_0(E) \quad (\text{B.11})$$

où  $j = L, R$  et qui conduit à la règle de somme supplémentaire :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_L^+(E) W_{Lj}(\theta, \theta', E) + \rho_R^-(E) W_{Rj}(\theta, \theta', E)] = 1 \quad j = L, R \quad (\text{B.12})$$

## B.2 Version macroscopique des conditions d'interface

Dans cette section, nous présentons la méthode permettant d'établir les conditions de bords macroscopiques 2.149, 2.150, 2.151 et 2.152 à partir des équations de collisions microscopiques 2.130 et 2.131. Pour cela, on rappelle que les fonctions de distribution s'écrivent sous la forme :

$$f^\pm(X, \theta) = f_0 + \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} g^\pm(X, \theta) \quad (\text{B.13})$$

avec

$$\sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm(X) P_n(\cos \theta) \quad (\text{B.14})$$

Les intégrales sur l'angle  $\theta'$  intervenant dans les équations 2.130 et 2.131 peuvent être effectuées. Elles conduisent alors aux équations :

$$g_R^+(\theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) [W_{LR}^n g_{nL}^+ + W_{RR}^n g_{nR}^-] P_n(\cos \theta) \quad (\text{B.15})$$

$$g_L^-(\theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) [W_{LL}^n g_{nL}^+ + W_{RL}^n g_{nR}^-] P_n(\cos \theta) \quad (\text{B.16})$$

puisque compte tenu de la règle de compatibilité avec l'état d'équilibre, la fonction de distribution d'équilibre disparaît des équations de collisions.

On notera que ces équations sont valables pour une énergie donnée. Ainsi, pour obtenir des équations sur les valeurs moyennes, il faut multiplier les deux équations par  $\epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$  avant de faire les intégrations. En particulier, on utilisera les relations :

$$-e \int d^3 \vec{v} \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} h(v) f(\cos \theta) = \frac{3}{4} e n_0 h(v_f) f_0 \quad (\text{B.17})$$

$$-e \int d^3 \vec{v} \pm v \cos \theta \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} h(v) f(\cos \theta) = \pm \frac{3}{4} e n_0 v_f h(v_f) \frac{1}{2} (f_0 + f_1) \quad (\text{B.18})$$

où  $h$  est une fonction de la vitesse,  $n_0$  la densité d'équilibre,  $v_f$  la vitesse de Fermi et  $f$  une fonction développable sur la base des polynômes de Legendre décalés :

$$f(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) f_n P_n(\cos \theta) \quad (\text{B.19})$$

Le passage à des équations macroscopiques est rendu possible ici par le fait que la dérivée de la fonction de distribution par rapport à l'énergie est une fonction de Dirac rendant ainsi l'intégration sur l'énergie triviale. Lorsque ce n'est pas le cas, les équations qu'on s'appête à écrire ne seront plus valables et il faut alors spécifier la dépendance en énergie des taux de transitions pour écrire de nouvelles équations.

### Condition d'interface pour la densité de charge

En multipliant B.15 et B.16 par  $\epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$  et la charge électrique et intégrant sur l'angle  $\theta$  et l'énergie, on obtient :

$$n_R^+ = W_{LR}^{00} n_L^+ + W_{RR}^{00} n_R^- \quad (\text{B.20})$$

$$n_L^- = W_{LL}^{00} n_L^+ + W_{RL}^{00} n_R^- \quad (\text{B.21})$$

On constate alors qu'en utilisant les contraintes liées aux règles de somme, on peut écrire ces équations sous la forme :

$$n_R^+ = T n_L^+ + (1 - T) n_R^- \quad (\text{B.22})$$

$$n_L^- = (1 - T) n_L^+ + T n_R^- \quad (\text{B.23})$$

qui correspondent aux équations 2.149 et 2.150.

### Condition d'interface pour le courant

En multipliant B.15 et B.16 par  $\epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$ , la charge électrique et la vitesse et intégrant sur l'angle  $\theta$  et l'énergie, on obtient :

$$J_R^+ = W_{LR}^{00} J_{0L}^+ + 3W_{LR}^{11} J_{1L}^+ - W_{RR}^{00} J_{0R}^- - 3W_{RR}^{11} J_{1R}^- \quad (\text{B.24})$$

$$J_L^- = -W_{LL}^{00} J_{0L}^+ - 3W_{LL}^{11} J_{1L}^+ + W_{RL}^{00} J_{0R}^- + 3W_{RL}^{11} J_{1R}^- \quad (\text{B.25})$$

On constate alors qu'en utilisant les contraintes liées aux règles de somme, on peut écrire ces équations sous la forme :

$$J_R^+ = T J_{0L}^+ + t_1 J_{1L}^+ - (1 - T) J_{0R}^- - (1 - t_2) J_{1R}^- \quad (\text{B.26})$$

$$J_L^- = T J_{0R}^- + t_2 J_{1R}^- - (1 - T) J_{0L}^+ - (1 - t_1) J_{1L}^+ \quad (\text{B.27})$$

fournissant ainsi les équations 2.151 et 2.152.

## Annexe C

# Détails de calculs pour les vannes de spin colinéaires

### C.1 Les équations de transport

#### C.1.1 Chiralisation de l'équation de Boltzmann

Comme dans le cadre du transport pur de charge, la fonction de distribution  $f_s$  est scindée en deux contributions :  $f_s^+$  décrivant les électrons se dirigeant vers la droite dans l'état de spin  $s$  et  $f_s^-$  caractérisant les électrons se propageant vers la gauche avec le spin  $s$ . Ainsi, à cause de la polarisation en spin, la fonction de distribution possède quatre composantes. La procédure de séparation de l'équation de Boltzmann est identique au transport de charge et la chiralisation de l'équation 4.3 conduit à :

$$\begin{aligned} \pm v_x \frac{\partial f_s^\pm}{\partial x} \pm ev_x \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f_s^\pm}{\partial \epsilon} = & - \left( \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_{sf}} \right) f_s^\pm + \frac{1}{\tau_s} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_s^+(\Omega') + f_s^-(\Omega')) \\ & + \frac{1}{\tau_{sf}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (f_{-s}^+(\Omega') + f_{-s}^-(\Omega')) \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

On linéarise ensuite cette équation autour de l'état d'équilibre par rapport au champ électrique. On introduit alors les grandeurs sans dimensions :

$$f_s^\pm(x, \theta) = f_0 + \epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} g_s^\pm(x, \theta) \quad (\text{C.2})$$

$$V(x) = V_0 \bar{V}(x) \quad V_0 = \frac{\epsilon_f}{e} \quad (\text{C.3})$$

qui conduisent à l'équation de Boltzmann linéarisée :

$$\pm \cos \theta \frac{\partial}{\partial x} [g_s^\pm + \bar{V}] = - \frac{g_s^\pm}{\lambda_s} + \frac{1}{\ell_s} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (g_s^+(\Omega') + g_s^-(\Omega')) + \frac{1}{\ell_{sf}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} (g_{-s}^+(\Omega') + g_{-s}^-(\Omega')) \quad (\text{C.4})$$

Comme pour le transport de charge, la partie hors-équilibre de la fonction de distribution sera décomposée sur la base des polynômes de Legendre décalés :

$$g_s^\pm(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} g_{sn}^\pm(x) P_n(\cos \theta) \quad (\text{C.5})$$

et l'on ne conservera que les deux premières composantes de ce développement ( $g_{s0}^\pm$  et  $g_{s1}^\pm$ ). La connaissance des deux premières composantes  $g_{s0}^\pm$  et  $g_{s1}^\pm$  permettent alors de calculer toutes les grandeurs macroscopiques d'intérêts puisque les accumulations de charge par chiralité et état de spin s'écrivent :

$$n_s^\pm(x) = \frac{3}{8} e n_0 g_{s0}^\pm \quad (\text{C.6})$$

et les profils de courant par chiralité et état de spin sont donnés par :

$$J_s^\pm(x) = \pm \frac{3}{8} e n_0 v_f \left( \frac{1}{6} g_{s1}^\pm + \frac{1}{2} g_{s0}^\pm \right) \quad (\text{C.7})$$

qui sont décomposés en la somme d'une composante isotrope  $J_{0s}^\pm$  et anisotrope  $J_{1s}^\pm$  qui s'expriment par :

$$J_{0s}^\pm(x) = \pm \frac{v_f}{2} n_s^\pm(x) \quad J_{1s}^\pm(x) = \pm \frac{1}{16} e n_0 v_f g_{s1}^\pm \quad (\text{C.8})$$

## C.2 Projection de l'équation de Boltzmann

Pour projeter l'équation de Boltzmann C.4, il est utile d'introduire les quantités :

$$S_s = g_s^+ + g_s^- + 2\bar{V} \quad D_s = g_s^+ - g_s^- \quad (\text{C.9})$$

qui permettent de réécrire l'équation de Boltzmann C.4 sous la forme :

$$\cos \theta \frac{\partial D_s}{\partial x} = -\frac{S_s}{\lambda_s} + \frac{1}{\ell_s} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' S_s(x, \theta') + \frac{1}{\ell_{sf}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' S_{-s}(x, \theta') \quad (\text{C.10})$$

$$\cos \theta \frac{\partial S_s}{\partial x} = -\frac{D_s}{\lambda_s} \quad (\text{C.11})$$

On décompose ensuite les fonctions  $S_s$  et  $D_s$  sur les polynômes de Legendre décalés :

$$S_\sigma(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} S_{\sigma n} P_n(\cos \theta) \quad D_\sigma(x, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} D_{\sigma n} P_n(\cos \theta) \quad (\text{C.12})$$

La technique de projection étant identique à celle utilisée pour le transport de charge, on donnera directement le résultat de la projection :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_n \partial_x D_{sn} \left[ \frac{(n+1)}{(2n+1)(2n+3)} \delta_{m,n+1} + \frac{n}{(2n+1)(2n-1)} \delta_{m,n-1} + \frac{1}{(2n+1)} \delta_{m,n} \right] \\ &= -\frac{1}{\lambda_s} \sum_n S_{sn} \frac{1}{(2n+1)} \delta_{m,n} + \left( \frac{S_{s0}}{\ell_s} + \frac{S_{-s0}}{\ell_{sf}} \right) \delta_{m,0} \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$



$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_n \partial_x S_{sn} \left[ \frac{(n+1)}{(2n+1)(2n+3)} \delta_{m,n+1} + \frac{n}{(2n+1)(2n-1)} \delta_{m,n-1} + \frac{1}{(2n+1)} \delta_{m,n} \right] \\ &= -\frac{1}{\lambda_s} \sum_n D_{sn} \frac{1}{(2n+1)} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

En spécifiant les valeurs de  $m$ , on obtient alors un ensemble infini d'équations différentielles couplées :

$$- m = 0 : \quad \frac{1}{6} \frac{\partial D_{s1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{s0}}{\partial x} = \frac{1}{\ell_{sf}} (S_{-s0} - S_{s0}) \quad (\text{C.15})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial S_{s1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_{s0}}{\partial x} = -\frac{D_{s0}}{\lambda_s} \quad (\text{C.16})$$

-  $m \geq 1$

$$\frac{m}{2(2m-1)} \frac{\partial D_{sm-1}}{\partial x} + \frac{(m+1)}{2(2m+3)} \frac{\partial D_{sm+1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{sm}}{\partial x} = -\frac{S_{sm}}{\lambda_s} \quad (\text{C.17})$$

$$\frac{m}{2(2m-1)} \frac{\partial S_{sm-1}}{\partial x} + \frac{(m+1)}{2(2m+3)} \frac{\partial S_{sm+1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_{sm}}{\partial x} = -\frac{D_{sm}}{\lambda_s} \quad (\text{C.18})$$

Dans la pratique, on ne retiendra que les composantes d'ordre zéro et un. Ainsi, le système d'équations tronqué à l'ordre un s'écrit ( $s = \uparrow, \downarrow$ ) :

$$\frac{1}{6} \frac{\partial D_{s1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{s0}}{\partial x} = \frac{1}{\ell_{sf}} (S_{-s0} - S_{s0}) \quad (\text{C.19})$$

$$\frac{1}{6} \frac{\partial S_{s1}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_{s0}}{\partial x} = -\frac{D_{s0}}{\lambda_s} \quad (\text{C.20})$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial D_{s0}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial D_{s1}}{\partial x} = -\frac{S_{s1}}{\lambda_s} \quad (\text{C.21})$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial S_{s0}}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial S_{s1}}{\partial x} = -\frac{D_{s1}}{\lambda_s} \quad (\text{C.22})$$

### C.2.1 Éléments de calcul de la solution à l'ordre un

Pour déterminer la solution du système d'équations encadré de la section précédente, il est utile d'écrire des équations ne faisant intervenir qu'une seule dérivée par équation :

$$\frac{\partial D_{s1}}{\partial x} = -\frac{3}{\ell_{sf}} (S_{-s0} - S_{s0}) - 3 \frac{S_{s1}}{\lambda_s} \quad (\text{C.23})$$

$$\frac{\partial D_{s0}}{\partial x} = \frac{3}{\ell_{sf}} (S_{-s0} - S_{s0}) + \frac{S_{s1}}{\lambda_s} \quad (\text{C.24})$$

$$\frac{\partial S_{s1}}{\partial x} = \frac{3}{\lambda_s} (D_{s0} - D_{s1}) \quad (\text{C.25})$$

$$\frac{\partial S_{s0}}{\partial x} = \frac{1}{\lambda_s} (D_{s1} - 3D_{s0}) \quad (\text{C.26})$$

On remarque qu'il est naturel d'introduire la fonction :

$$S_{0A} = S_{s0} - S_{-s0} \quad (\text{C.27})$$

et par conséquent la fonction

$$S_{0S} = S_{s0} + S_{-s0} \quad (\text{C.28})$$

Grâce à l'introduction de ces deux fonctions, on peut alors écrire un système d'équations autonomes pour les fonctions  $S_{0A}$  et  $S_{s1}$  :

$$\frac{\partial^2 S_{0A}}{\partial x^2} = -\frac{6}{\lambda_{\uparrow}^2} S_{\uparrow 1} + \frac{6}{\lambda_{\downarrow}^2} S_{\downarrow 1} + \frac{12}{\ell_{sf}} \left( \frac{1}{\lambda_{\uparrow}} + \frac{1}{\lambda_{\downarrow}} \right) S_{0A} \quad (\text{C.29})$$

$$\frac{\partial^2 S_{\uparrow 1}}{\partial x^2} = \frac{12}{\lambda_{\uparrow}^2} S_{\uparrow 1} - \frac{18}{\ell_{sf} \lambda_{\uparrow}} S_{0A} \quad (\text{C.30})$$

$$\frac{\partial^2 S_{\downarrow 1}}{\partial x^2} = \frac{12}{\lambda_{\downarrow}^2} S_{\downarrow 1} + \frac{18}{\ell_{sf} \lambda_{\downarrow}} S_{0A} \quad (\text{C.31})$$

qu'on peut sous la forme matricielle :

$$\partial_x^2 \begin{pmatrix} S_{0A} \\ S_{\uparrow 1} \\ S_{\downarrow 1} \end{pmatrix} = 6 \begin{pmatrix} \frac{2}{\ell_{sf}} \left( \frac{1}{\lambda_{\uparrow}} + \frac{1}{\lambda_{\downarrow}} \right) & -\frac{1}{\lambda_{\uparrow}^2} & \frac{1}{\lambda_{\downarrow}^2} \\ -\frac{3}{\ell_{sf} \lambda_{\uparrow}} & \frac{2}{\lambda_{\uparrow}^2} & 0 \\ \frac{3}{\ell_{sf} \lambda_{\downarrow}} & 0 & \frac{2}{\lambda_{\downarrow}^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{0A} \\ S_{\uparrow 1} \\ S_{\downarrow 1} \end{pmatrix} \quad (\text{C.32})$$

En notant génériquement  $\frac{1}{\ell_i^2}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , les valeurs propres de cette matrice et en choisissant d'écrire  $S_{0A}$  sous la forme :

$$S_{0A}(x) = \sum_{i=1}^3 a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \quad (\text{C.33})$$

On déduit alors que les fonctions  $S_{1s}$  prennent la forme :

$$S_{\uparrow 1}(x) = -\sum_{i=1}^3 \frac{18\lambda_{\uparrow}\ell_i^2}{\ell_{sf}(\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.34})$$

$$S_{\downarrow 1}(x) = \sum_{i=1}^3 \frac{18\lambda_{\downarrow}\ell_i^2}{\ell_{sf}(\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.35})$$

et qu'on a la relation :

$$\frac{12\ell_i^2(\lambda_{\uparrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\uparrow}\ell_{sf}(\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} + \frac{12\ell_i^2(\lambda_{\downarrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\downarrow}\ell_{sf}(\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} = 1 \quad (\text{C.36})$$

compte tenu de l'équation vérifiée par les valeurs propres  $\ell_i$ .

A partir de ces trois fonctions, on peut alors en déduire toutes les fonctions D en les injectant dans les équations différentielles. On obtient alors :

$$D_{0\uparrow}(x) = \frac{\lambda_{\uparrow}}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} c - \sum_{i=1}^3 \frac{3\ell_i (\lambda_{\uparrow}^2 - 6\ell_i^2)}{\ell_{sf} (\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.37})$$

$$D_{1\uparrow}(x) = \frac{\lambda_{\uparrow}}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} c + \sum_{i=1}^3 \frac{3\ell_i (\lambda_{\uparrow}^2 + 6\ell_i^2)}{\ell_{sf} (\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.38})$$

$$D_{0\downarrow}(x) = \frac{\lambda_{\downarrow}}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} c + \sum_{i=1}^3 \frac{3\ell_i (\lambda_{\downarrow}^2 - 6\ell_i^2)}{\ell_{sf} (\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.39})$$

$$D_{1\downarrow}(x) = \frac{\lambda_{\downarrow}}{\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow}} c - \sum_{i=1}^3 \frac{3\ell_i (\lambda_{\downarrow}^2 + 6\ell_i^2)}{\ell_{sf} (\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.40})$$

On en déduit ensuite que la fonction  $S_{0S}$  peut s'écrire sous les formes équivalentes (à cause de C.36) :

$$S_{0S}(x) = d - \frac{4c}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})} x - \sum_{i=1}^3 \left( 1 - \frac{24\ell_i^2 (\lambda_{\uparrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\uparrow} \ell_{sf} (\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} \right) \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.41})$$

$$S_{0S}(x) = d - \frac{4c}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})} x + \sum_{i=1}^3 \left( 1 - \frac{24\ell_i^2 (\lambda_{\downarrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\downarrow} \ell_{sf} (\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} \right) \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) \quad (\text{C.42})$$

Le potentiel électrique adimensionné  $\bar{V}$  vérifie alors l'équation :

$$\frac{\partial^2 \bar{V}}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda_{TF}^2} \bar{V} = -\frac{1}{4\lambda_{TF}^2} S_{0S}(x) \quad (\text{C.43})$$

dont la solution s'écrit :

$$\bar{V}(x) = \frac{d}{4} - \frac{c}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})} x - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{4 \left( 1 - \frac{\lambda_{TF}^2}{\ell_i^2} \right)} \left( 1 - \frac{24\ell_i^2 (\lambda_{\uparrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\uparrow} \ell_{sf} (\lambda_{\uparrow}^2 - 12\ell_i^2)} \right) \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \beta_1 e^{\frac{x}{\ell_i}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\ell_i}} \quad (\text{C.44})$$

ou encore

$$\bar{V}(x) = \frac{d}{4} - \frac{c}{(\lambda_{\uparrow} + \lambda_{\downarrow})} x + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{4 \left( 1 - \frac{\lambda_{TF}^2}{\ell_i^2} \right)} \left( 1 - \frac{24\ell_i^2 (\lambda_{\downarrow}^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda_{\downarrow} \ell_{sf} (\lambda_{\downarrow}^2 - 12\ell_i^2)} \right) \left( a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \beta_1 e^{\frac{x}{\ell_i}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\ell_i}} \quad (\text{C.45})$$

à cause des deux expressions équivalentes de la fonction  $S_{0S}$ . On remarque alors qu'on a la relation

$$\frac{1}{4\left(1 - \frac{\lambda_{TF}^2}{\ell_i^2}\right)} \left(1 - \frac{24\ell_i^2(x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf}(x^2 - 12\ell_i^2)}\right) = \frac{1}{2}(q_{1i}(x) + q_{2i}(x)) - \frac{6\ell^2(x^2 - 3\ell_i^2)}{x\ell_{sf}(x^2 - 12\ell_i^2)} \quad (\text{C.46})$$

permettant de réécrire les expressions du potentiel électrique en fonction des coefficients  $q$  introduits dans le chapitre principal.

A partir des fonctions  $S$ ,  $D$  et  $\bar{V}$ , on peut alors calculer les composantes  $g_{0,1}^\pm$  des fonctions de distributions :

$$g_{sn}^\pm = \frac{1}{2}(S_{sn} \pm D_{sn}) - \bar{V}\delta_{n,0} \quad (\text{C.47})$$

les calculs sont alors sans difficultés. On notera enfin que le courant de charge est lié à la constante  $c$  par la relation :

$$c = \frac{4J_c}{en_0v_f} \quad (\text{C.48})$$

et qu'on normalise toutes les constantes d'intégration ( $a_i, b_i, \beta_1, \beta_2, d$ ) avec cette quantité (on met en facteur le coefficient  $c$ ). En poursuivant les calculs, on obtient alors l'expression des grandeurs macroscopiques présentées dans le chapitre principal.

### C.3 Grandeurs macroscopiques lorsque $\ell_\uparrow = \ell_\downarrow$

On notera  $\ell$  la valeur commune de  $\ell_\uparrow$  et  $\ell_\downarrow$ . On posera :

$$\frac{1}{\ell_1^2} = \frac{6}{\lambda} \left( \frac{2}{\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda} + \sqrt{\frac{4}{\ell_{sf}^2} + \frac{2}{\lambda\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda^2}} \right) \quad (\text{C.49})$$

$$\frac{1}{\ell_2^2} = \frac{6}{\lambda} \left( \frac{2}{\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda} - \sqrt{\frac{4}{\ell_{sf}^2} + \frac{2}{\lambda\ell_{sf}} + \frac{1}{\lambda^2}} \right) \quad (\text{C.50})$$

$$\frac{1}{\ell_3^2} = \frac{12}{\lambda^2} \quad (\text{C.51})$$

avec

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\ell} + \frac{1}{\ell_{sf}} \quad (\text{C.52})$$

l'indice  $i = 1, 2$  fera référence aux longueurs  $\ell_1$  et  $\ell_2$ . On peut noter la relation :

$$\frac{24\ell_i^2(\lambda^2 - 3\ell_i^2)}{\lambda\ell_{sf}(\lambda^2 - 12\ell_i^2)} = 1 \quad i = 1 \text{ ou } 2 \quad (\text{C.53})$$

On introduit ensuite les coefficients :

$$q_{1i} = \frac{1}{4} - \frac{3\ell_i(\lambda^2 - 6\ell_i^2)}{2\ell_{sf}(\lambda^2 - 12\ell_i^2)} \quad (\text{C.54})$$

$$q_{2i} = \frac{1}{4} + \frac{3\ell_i(\lambda^2 - 6\ell_i^2)}{2\ell_{sf}(\lambda^2 - 12\ell_i^2)} \quad (\text{C.55})$$

$$\Gamma_{1i} = \frac{3\ell_i(\lambda^2 + 6\ell_i^2) - 18\lambda\ell_i^2}{\ell_{sf}(\lambda^2 - 12\ell_i^2)} \quad (\text{C.56})$$

$$\Gamma_{2i} = \frac{3\ell_i(\lambda^2 + 6\ell_i^2) + 18\lambda\ell_i^2}{\ell_{sf}(\lambda^2 - 12\ell_i^2)} \quad (\text{C.57})$$

et on posera

$$\eta = \frac{\lambda}{\lambda_{TF}} \quad (\text{C.58})$$

Les accumulations de charge par spin et par chiralité s'écrivent alors sous la forme :

$$\begin{aligned} n_{\uparrow}^+(x) &= \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \frac{1}{4} + \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} - \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) b_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \\ &+ \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \sum_{i=1}^2 \left( q_{1i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + q_{2i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) - \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

$$\begin{aligned} n_{\uparrow}^-(x) &= \frac{3J_c}{2v_f} \left[ -\frac{1}{4} - \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} + \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) b_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \\ &+ \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \sum_{i=1}^2 \left( q_{2i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + q_{1i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) - \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

$$\begin{aligned} n_{\downarrow}^+(x) &= \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \frac{1}{4} + \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} - \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) b_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \\ &- \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \sum_{i=1}^2 \left( q_{1i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + q_{2i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.61})$$

$$\begin{aligned} n_{\downarrow}^-(x) &= \frac{3J_c}{2v_f} \left[ -\frac{1}{4} - \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} + \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} + \left( \frac{1}{2\sqrt{12}} - \frac{3}{(12-\eta^2)} \right) b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \\ &- \frac{3J_c}{2v_f} \left[ \sum_{i=1}^2 \left( q_{2i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} + q_{1i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.62})$$

Les composantes anisotropes du courant sont données par :

$$J_{1\uparrow}^+(x) = \frac{J_c}{8} \left[ \frac{1}{2} + \sum_{i=1}^2 \left( \Gamma_{1i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - \Gamma_{2i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} + \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \quad (\text{C.63})$$

$$J_{1\uparrow}^-(x) = \frac{J_c}{8} \left[ \frac{1}{2} + \sum_{i=1}^2 \left( \Gamma_{2i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - \Gamma_{1i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) - \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} - \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \quad (\text{C.64})$$

$$J_{1\downarrow}^+(x) = \frac{J_c}{8} \left[ \frac{1}{2} - \sum_{i=1}^2 \left( \Gamma_{1i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - \Gamma_{2i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) + \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} + \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \quad (\text{C.65})$$

$$J_{1\downarrow}^-(x) = \frac{J_c}{8} \left[ \frac{1}{2} - \sum_{i=1}^2 \left( \Gamma_{2i} a_i e^{\frac{x}{\ell_i}} - \Gamma_{1i} b_i e^{-\frac{x}{\ell_i}} \right) - \left( 1 + \frac{3}{\sqrt{12}} \right) a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} - \left( 1 - \frac{3}{\sqrt{12}} \right) b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right] \quad (\text{C.66})$$

Le potentiel électrique  $V$  et la résistivité  $\rho$  ne dépendent que des constantes  $a_3$  et  $b_3$  :

$$V(x) = \frac{2\lambda J_c}{\sigma_d} \left[ \frac{d}{4} - \frac{x}{2\lambda} + \frac{\eta^2}{4(12-\eta^2)} \left( a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} + b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right) + \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} + \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right] \quad (\text{C.67})$$

$$\rho(x) = \frac{1}{\sigma_d} \left[ 1 - \frac{\eta^2 \sqrt{12}}{2(12-\eta^2)} \left( a_3 e^{\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} - b_3 e^{-\frac{x\sqrt{12}}{\lambda}} \right) - \frac{2\lambda}{\lambda_{TF}} \left( \beta_1 e^{\frac{x}{\lambda_{TF}}} - \beta_2 e^{-\frac{x}{\lambda_{TF}}} \right) \right] \quad (\text{C.68})$$

où l'on a introduit  $\sigma_d = \frac{e^2 n_0 \lambda}{m v_f}$ .

Avec toutes les grandeurs exposées ici, on peut alors calculer toutes les autres quantités macroscopiques.

## C.4 Polarisation en spin des effets d'interface

### C.4.1 Généralisation des collisions d'interfaces

En présence d'une polarisation en spin, les collisions d'interface affectent également l'état de spin de l'électron en plus de modifier la direction et le sens de sa vitesse. Ainsi, les collisions d'interface introduites pour un transport purement de charge se généralisent sous la forme :

$$\begin{aligned} f_{Rs}^+(\theta) &= \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{LR}^s(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^+(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{LR}^{s,s}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^+(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{RR}^s(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Rs}^-(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{RR}^{s,-s}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{R-s}^-(\Omega', v') \end{aligned} \quad (\text{C.69})$$

$$\begin{aligned} f_{Ls}^-(\theta) &= \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{LL}^s(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^+(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_L}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{LL}^{s,-s}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^+(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{RL}^s(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Rs}^-(\Omega', v') \\ &+ \left( \frac{m_R}{h} \right)^3 \int d^3 \vec{v}' W_{RL}^{s,-s}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{R-s}^-(\Omega', v') \end{aligned} \quad (\text{C.70})$$

dans lesquelles la coordonnée spatiale  $x$  vaut implicitement celle de l'interface.

Dans ces équations, les taux  $W^s$  décrivent des processus de collision conservant le spin alors que  $W^{s,-s}$  traduisent les effets de spin flip. La fonction delta en énergie caractérise le fait que les collisions sont élastiques et l'angle solide  $\Omega$  désigne les angles de la vitesse  $(\theta, \varphi)$ . Enfin, la notation  $f$  désigne ici la fonction de distribution totale, somme de sa partie d'équilibre et de sa partie hors-équilibre.

Comme de coutume, l'intégrale sur la vitesse  $\vec{v}'$  peut être faite en partie et les équations de collisions d'interface prennent les formes :

$$\begin{aligned} f_{Rs}^+(\theta) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^+(E) W_{LR}^s(\theta, \theta', E) f_{Ls}^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sL}^+(E) W_{LR}^{s,-s}(\theta, \theta', E) f_{L-s}^+(\theta', v) \\ &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sR}^-(E) W_{RR}^s(\theta, \theta', E) f_{Rs}^-(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sR}^-(E) W_{RR}^{s,-s}(\theta, \theta', E) f_{R-s}^-(\theta', v) \end{aligned} \quad (C.71)$$

$$\begin{aligned} f_{Ls}^-(\theta) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^+(E) W_{LL}^s(\theta, \theta', E) f_{Ls}^+(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sL}^+(E) W_{LL}^{s,-s}(\theta, \theta', E) f_{L-s}^+(\theta', v) \\ &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sR}^-(E) W_{RL}^s(\theta, \theta', E) f_{Rs}^-(\theta', v) + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sR}^-(E) W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta', E) f_{R-s}^-(\theta', v) \end{aligned} \quad (C.72)$$

dans lesquelles on a introduit la densité d'état  $\rho(E)_{sL,R}^\pm = \frac{2\pi\sqrt{2}}{h^3} m_{L,R}^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_{0L,R}}$  par spin et chiralité.

Les taux de transitions sont alors contraints par les lois de conservation et vérifient donc certaines règles de somme que l'on présente maintenant.

### C.4.2 Lois de conservation et règles de somme

En présence d'une polarisation, la conservation du nombre de particules entrant et sortant à l'interface et la continuité du courant se généralise sous la forme :

$$n_{R\uparrow}^+ + n_{R\downarrow}^+ + n_{L\uparrow}^- + n_{L\downarrow}^- = n_{R\uparrow}^- + n_{R\downarrow}^- + n_{L\uparrow}^+ + n_{L\downarrow}^+ \quad (C.73)$$

$$J_{R\uparrow}^+ + J_{R\uparrow}^- + J_{R\downarrow}^+ + J_{R\downarrow}^- = J_{L\uparrow}^+ + J_{L\uparrow}^- + J_{L\downarrow}^+ + J_{L\downarrow}^- \quad (C.74)$$

Pour que les équations de collisions C.71 et C.72 soient compatibles avec de telles lois, les taux de transitions doivent vérifier les règles de somme :

– **Conservation des particules :**

$$\begin{aligned} \rho_{Ls}^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{LL}^s(\theta, \theta', E) + W_{LL}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] \\ + \rho_{Ls}^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{LR}^s(\theta, \theta', E) + W_{LR}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] = 1 \end{aligned} \quad (C.75)$$

$$\begin{aligned} \rho_{Rs}^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{RR}^s(\theta, \theta', E) + W_{RR}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] \\ + \rho_{Rs}^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta [W_{RL}^s(\theta, \theta', E) + W_{RL}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] = 1 \end{aligned} \quad (C.76)$$

– **Conservation du courant :**

$$\begin{aligned} & \rho_{Ls}^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{LL}^s(\theta, \theta', E) + W_{LL}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] \\ & + \rho_{Ls}^+(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{LR}^s(\theta, \theta', E) + W_{LR}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \end{aligned} \quad (\text{C.77})$$

$$\begin{aligned} & \rho_{Rs}^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{RR}^s(\theta, \theta', E) + W_{RR}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] \\ & + \rho_{Rs}^-(E) \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta [W_{RL}^s(\theta, \theta', E) + W_{RL}^{-s,s}(\theta, \theta', E)] = \cos \theta' \end{aligned} \quad (\text{C.78})$$

D'autre part, la fonction de distribution d'équilibre étant commune à toutes les couches, elle doit donc être invariante par les collisions d'interface. Cette propriété conduit à la règle de somme relative à la **compatibilité avec l'état d'équilibre** :

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sL}^+(E) W_{LR}^s(\theta, \theta', E) + \rho_{-sL}^+(E) W_{LR}^{s,-s}(\theta, \theta', E)] \\ & + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sR}^-(E) W_{RR}^s(\theta, \theta', E) + \rho_{-sR}^-(E) W_{RR}^{s,-s}(\theta, \theta', E)] = 1 \end{aligned} \quad (\text{C.79})$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sL}^+(E) W_{LL}^s(\theta, \theta', E) + \rho_{-sL}^+(E) W_{LL}^{s,-s}(\theta, \theta', E)] \\ & + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sR}^-(E) W_{RL}^s(\theta, \theta', E) + \rho_{-sR}^-(E) W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta', E)] = 1 \end{aligned} \quad (\text{C.80})$$

En plus des contraintes d'ordre macroscopique, on supposera que les taux de transitions restent invariants sous la permutation des angles d'entrées et de sortie :

$$W_{ij}^s(\theta, \theta') = W_{ij}^s(\theta', \theta) \quad W_{ij}^{s,-s}(\theta, \theta') = W_{ij}^{s,-s}(\theta', \theta) \quad (\text{C.81})$$

Les taux de transition sont alors décomposés sur la base des polynômes de Legendre décalés sous la forme diagonale :

$$\rho_{i,s}^\pm(E) W_{ij}^s(\theta, \theta', E) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1)^2 W_{ij}^{s,n}(E) P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \quad (\text{C.82})$$

qui en les injectant dans les différentes règles de somme conduisent au système :

$$\begin{cases} W_{ii}^{s0} + W_{ii}^{-s,s0} + W_{ij}^{s0} + W_{ij}^{-s,s0} = 1 \\ W_{ij}^{s0} + W_{ij}^{s,-s0} + W_{jj}^{s0} + W_{jj}^{s,-s0} = 1 \\ W_{ii}^{s1} + W_{ii}^{-s,s1} + W_{ij}^{s1} + W_{ij}^{-s,s1} = \frac{1}{3} \end{cases} \quad (\text{C.83})$$

qui couple entre eux les différentes composantes d'ordre zéro et un et réduit ainsi le nombre de degré de liberté. A partir de ces équations, on adoptera la théorie minimale :



– pour les composantes d'ordre zéro :

$$W_{LL}^{s0} = W_{RR}^{s0} = R_s \quad W_{RL}^{s0} = W_{LR}^{s0} = T_s \quad (\text{C.84})$$

$$W_{LL}^{s,-s0} = W_{RR}^{s,-s0} = W_{LL}^{-s,s0} = W_{RR}^{-s,s0} = R_{sf} \quad (\text{C.85})$$

$$W_{LR}^{s,-s0} = W_{RL}^{s,-s0} = W_{LR}^{-s,s0} = W_{RL}^{-s,s0} = T_{sf} \quad (\text{C.86})$$

avec

$$R_s + T_s + R_{sf} + T_{sf} = 1 \quad (\text{C.87})$$

– pour les composantes d'ordre un :

$$3W_{LL}^{s1} = 3W_{RR}^{s1} = r_s \quad 3W_{RL}^{s1} = 3W_{LR}^{s1} = t_s \quad (\text{C.88})$$

$$3W_{LL}^{s,-s1} = 3W_{RR}^{s,-s1} = 3W_{LL}^{-s,s1} = 3W_{RR}^{-s,s1} = r_{sf} \quad (\text{C.89})$$

$$3W_{LR}^{s,-s1} = 3W_{RL}^{s,-s1} = 3W_{LR}^{-s,s1} = 3W_{RL}^{-s,s1} = t_{sf} \quad (\text{C.90})$$

avec

$$r_s + t_s + r_{sf} + t_{sf} = 1 \quad (\text{C.91})$$

### C.4.3 Equations d'interface macroscopiques

Les équations de collision d'interface C.71 et C.72 peuvent être traduites sous forme d'équations concernant les grandeurs macroscopiques. En particulier, en multipliant ces équations par  $-e\epsilon_f \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$  et  $-e\epsilon_f v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$ , on obtient des équations respectivement sur les accumulations de charge et les courants qui en utilisant la théorie minimale issue des règles de somme s'écrivent :

$$n_{Rs}^+ = R_s n_{Rs}^- + R_{sf} n_{R-s}^- + T_s n_{Ls}^+ + T_{sf} n_{L-s}^+ \quad (\text{C.92})$$

$$n_{Ls}^- = R_s n_{Ls}^+ + R_{sf} n_{L-s}^+ + T_s n_{Rs}^- + T_{sf} n_{R-s}^- \quad (\text{C.93})$$

$$\begin{aligned} J_{Rs}^+ &= T_s J_{0Ls}^+ + t_s J_{1Ls}^+ + T_{sf} J_{0L-s}^+ + t_{sf} J_{1L-s}^+ \\ &\quad - R_s J_{0Rs}^- - r_s J_{1Rs}^- - R_{sf} J_{0R-s}^- - r_{sf} J_{1R-s}^- \end{aligned} \quad (\text{C.94})$$

$$\begin{aligned} J_{Ls}^- &= -R_s J_{0Ls}^+ - r_s J_{1Ls}^+ - R_{sf} J_{0L-s}^+ - r_{sf} J_{1L-s}^+ \\ &\quad + T_s J_{0Rs}^- + t_s J_{1Rs}^- + T_{sf} J_{0R-s}^- + t_{sf} J_{1R-s}^- \end{aligned} \quad (\text{C.95})$$

qui ne sont qu'une simple généralisation des conditions d'interface du cas purement charge.

## C.5 Approche matrice de transfert pour les conditions d'interfaces

### C.5.1 Définition

Comme pour le transport de charge, les conditions d'interfaces peuvent être exprimées en terme de matrice de transfert plutôt que de matrice de scattering.

## C.5 Approche matrice de transfert pour les conditions d'interface 192

Dans la vision matrice de transfert, on exprime les fonctions de distributions des électrons se trouvant à droite de l'interface en fonction de celles des électrons se trouvant à gauche. Les équations de collisions d'interface prennent alors la forme :

$$\begin{aligned}
 f_{Rs}^+ &= \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_s^{++}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^+(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_s^{+-}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^-(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_{s,-s}^{++}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^+(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_{s,-s}^{+-}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^-(\Omega')
 \end{aligned} \tag{C.96}$$

$$\begin{aligned}
 f_{Rs}^- &= \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_s^{-+}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^+(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_s^{--}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{Ls}^-(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_{s,-s}^{-+}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^+(\Omega') \\
 &+ \left(\frac{m_L}{h}\right)^3 \int d^3\mathbf{v} M_{s,-s}^{--}(\Omega, \Omega', E) \delta(E - E') f_{L-s}^-(\Omega')
 \end{aligned} \tag{C.97}$$

Dans ces équations,  $\Omega$  désigne les composantes angulaires  $(\theta, \varphi)$  de la vitesse et la présence de la fonction delta de Dirac en énergie caractérise l'élasticité des collisions. Les différents taux de transfert  $M_s^{\alpha\beta}$  et  $M_{s,-s}^{\alpha\beta}$  se rapportent respectivement aux collisions sans spin-flip et avec retournement de spin.

L'intégration sur la vitesse peut être effectuée en partie. En particulier, l'intégration sur la norme et l'angle  $\varphi$  conduit à :

$$\begin{aligned}
 f_{Rs}^+ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin\theta' \rho_{Ls}^+(E) M_s^{++}(\theta, \theta') f_{Ls}^+(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin\theta' \rho_{Ls}^-(E) M_s^{+-}(\theta, \theta') f_{Ls}^-(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin\theta' \rho_{Ls}^+(E) M_{s,-s}^{++}(\theta, \theta') f_{L-s}^+(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin\theta' \rho_{Ls}^-(E) M_{s,-s}^{+-}(\theta, \theta') f_{L-s}^-(\theta')
 \end{aligned} \tag{C.98}$$

$$\begin{aligned}
 f_{Rs}^- &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{Ls}^+(E) M_s^{-+}(\theta, \theta') f_{Ls}^+(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{Ls}^-(E) M_s^{--}(\theta, \theta') f_{Ls}^-(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{Ls}^+(E) M_{s,-s}^{-+}(\theta, \theta') f_{L-s}^+(\theta') \\
 &+ \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{Ls}^-(E) M_{s,-s}^{--}(\theta, \theta') f_{L-s}^+(\theta')
 \end{aligned} \tag{C.99}$$

où l'on a introduit les densités d'état  $\rho$  par spin et par chiralité.

Les taux de transfert sont alors décomposés sur la base des polynômes de Legendre décalés et s'écrivent sous la forme diagonale :

$$\rho_s^\alpha(E) M_s^{\beta\alpha}(\theta, \theta', E) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1)^2 M_{sn}^{\beta\alpha} P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \tag{C.100}$$

### C.5.2 Règles de somme

Comme pour la représentation matrice de scattering, les taux de transferts  $M$  doivent être contraints afin que les conditions d'interfaces soient compatibles avec les lois de conservation macroscopiques. On obtient alors les règles de somme :

– **Conservation des particules :**

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \rho_{sL}^+(E) [M_s^{++}(\theta, \theta') + M_{-s,s}^{++}(\theta, \theta') - M_s^{-+}(\theta, \theta') - M_{-s,s}^{-+}(\theta, \theta')] = 1 \tag{C.101}$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \rho_{sL}^-(E) [M_s^{--}(\theta, \theta') + M_{-s,s}^{--}(\theta, \theta') - M_s^{+-}(\theta, \theta') - M_{-s,s}^{+-}(\theta, \theta')] = 1 \tag{C.102}$$

– **Conservation du courant :**

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta \rho_{sL}^+(E) [M_s^{++}(\theta, \theta') + M_{-s,s}^{++}(\theta, \theta') - M_s^{-+}(\theta, \theta') - M_{-s,s}^{-+}(\theta, \theta')] = \cos \theta' \tag{C.103}$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \cos \theta \rho_{sL}^-(E) [M_s^{+-}(\theta, \theta') + M_{-s,s}^{+-}(\theta, \theta') - M_s^{--}(\theta, \theta') - M_{-s,s}^{--}(\theta, \theta')] = \cos \theta' \tag{C.104}$$

– **Compatibilité avec l'état d'équilibre**

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{Ls}^+ M_s^{++}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^- M_s^{+-}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^+ M_{s,-s}^{++}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^- M_{s,-s}^{+-}(\theta, \theta')] = 1 \tag{C.105}$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{Ls}^+ M_s^{-+}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^- M_s^{--}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^+ M_{s,-s}^{-+}(\theta, \theta') + \rho_{Ls}^- M_{s,-s}^{--}(\theta, \theta')] = 1 \tag{C.106}$$

En utilisant alors la décomposition C.100 des taux de transfert, on aboutit alors aux équations indépendantes :

$$M_{s_0}^{--} + M_{-s, s_0}^{--} - M_{s_0}^{+-} - M_{-s, s_0}^{+-} = 1 \quad (\text{C.107})$$

$$M_{s_0}^{++} + M_{-s, s_0}^{++} - M_{s_0}^{-+} - M_{-s, s_0}^{-+} = 1 \quad (\text{C.108})$$

$$M_{s_0}^{++} + M_{s_0}^{+-} + M_{s, -s_0}^{++} + M_{s, -s_0}^{+-} = 1 \quad (\text{C.109})$$

$$M_{s_0}^{-+} + M_{s_0}^{--} + M_{s, -s_0}^{-+} + M_{s, -s_0}^{--} = 1 \quad (\text{C.110})$$

$$M_{s_1}^{++} + M_{-s, s_1}^{++} - M_{s_1}^{-+} - M_{-s, s_1}^{-+} = \frac{1}{3} \quad (\text{C.111})$$

$$M_{s_1}^{+-} + M_{-s, s_1}^{+-} - M_{s_1}^{--} - M_{-s, s_1}^{--} = -\frac{1}{3} \quad (\text{C.112})$$

qui lient entre eux les composantes d'ordre zéro et un des taux de transfert.

### C.5.3 Relations d'orthogonalité

Les taux de transfert  $M$  peuvent être reliés aux taux de scattering  $W$  grâce aux relations d'orthogonalité qui ont pour avantages d'exprimer les composantes des taux de transfert en fonction des coefficients de transmissions  $T$  et  $t$  et de vérifier ainsi directement les règles de somme établies au paragraphe précédent.

Les relations d'orthogonalité s'obtiennent en injectant les équations C.98 et C.99 dans les équations X et X. On obtient alors les deux ensembles d'équations équivalentes :

– **Ensemble 1 :**

$$\begin{aligned} & \rho_{sL}^+ M_s^{++}(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^- M_s^{+-}(\theta, \theta') \rho_{sL}^+ W_{LL}^s(\theta', \theta'') \\ & + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^- M_{s, -s}^{+-}(\theta, \theta') \rho_{sL}^+ W_{LL}^{-s, s}(\theta', \theta'') = \rho_{sL}^+ W_{LR}^s(\theta, \theta'') \end{aligned} \quad (\text{C.113})$$

$$\begin{aligned} & \rho_{sL}^+ M_{s, -s}^{++}(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^- M_s^{+-}(\theta, \theta') \rho_{-sL}^+ W_{LL}^{s, -s}(\theta', \theta'') \\ & + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sL}^- M_{s, -s}^{+-}(\theta, \theta') \rho_{sL}^+ W_{LL}^{-s}(\theta', \theta'') = \rho_{-sL}^+ W_{LR}^{s, -s}(\theta, \theta'') \end{aligned} \quad (\text{C.114})$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sL}^- M_s^{+-}(\theta, \theta') \rho_{sR}^- W_{RL}^s(\theta', \theta'') + \rho_{sL}^- M_{s, -s}^{+-}(\theta, \theta') \rho_{sR}^- W_{RL}^{-s, s}(\theta', \theta'')] \\ & = \rho_{sR}^- W_{RR}^s(\theta, \theta'') \end{aligned} \quad (\text{C.115})$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sL}^- M_s^{+-}(\theta, \theta') \rho_{-sR}^- W_{RL}^{s, -s}(\theta', \theta'') + \rho_{sL}^- M_{s, -s}^{+-}(\theta, \theta') \rho_{-sR}^- W_{RL}^{-s}(\theta', \theta'')] \\ & = \rho_{-sR}^- W_{RR}^{s, -s}(\theta, \theta'') \end{aligned} \quad (\text{C.116})$$

## C.5 Approche matrice de transfert pour les conditions d'interface 195

Ces équations se traduisent en composantes sous la forme :

$$M_{sn}^{++} + (2n+1) M_{sn}^{+-} W_{LLn}^s + (2n+1) M_{s,-sn}^{+-} W_{LLn}^{-s,s} = W_{LRn}^s \quad (\text{C.117})$$

$$M_{s,-sn}^{++} + (2n+1) M_{sn}^{+-} W_{LLn}^{s,-s} + (2n+1) M_{s,-sn}^{+-} W_{LLn}^{-s} = W_{LRn}^{s,-s} \quad (\text{C.118})$$

$$(2n+1) M_{sn}^{+-} W_{RLn}^s + (2n+1) M_{s,-sn}^{+-} W_{RLn}^{-s,s} = W_{RRn}^s \quad (\text{C.119})$$

$$(2n+1) M_{sn}^{+-} W_{RLn}^{s,-s} + (2n+1) M_{s,-sn}^{+-} W_{RLn}^{-s} = W_{RRn}^{s,-s} \quad (\text{C.120})$$

– **Ensemble 2 :**

$$\begin{aligned} \rho_{sL}^+ W_{LL}^s(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sR}^- W_{RL}^s(\theta, \theta') \rho_{sL}^+ M_s^{-+}(\theta', \theta'') \\ + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sR}^- W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta') \rho_{-sL}^+ M_{-s,s}^{-+}(\theta', \theta'') = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.121})$$

$$\begin{aligned} \rho_{-sL}^+ W_{LL}^{s,-s}(\theta, \theta'') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{sR}^- W_{RL}^s(\theta, \theta') \rho_{sL}^+ M_{s,-s}^{-+}(\theta', \theta'') \\ + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' \rho_{-sR}^- W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta') \rho_{-sL}^+ M_{-s}^{-+}(\theta', \theta'') = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.122})$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sR}^- W_{RL}^s(\theta, \theta') \rho_{sL}^- M_s^{--}(\theta', \theta'') + \rho_{-sR}^- W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta') \rho_{-sL}^- M_{-s,s}^{--}(\theta', \theta'')] \\ = \delta(\cos \theta - \cos \theta'') \end{aligned} \quad (\text{C.123})$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [\rho_{sR}^- W_{RL}^s(\theta, \theta') \rho_{sL}^- M_{s,-s}^{--}(\theta', \theta'') + \rho_{-sR}^- W_{RL}^{s,-s}(\theta, \theta') \rho_{-sL}^- M_{-s}^{--}(\theta', \theta'')] \\ = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.124})$$

En se rappelant que la fonction delta de Dirac admet le développement :

$$\delta(\cos \theta - \cos \theta') = \sum_{\alpha=0}^{+\infty} (2\alpha+1) P_\alpha(\cos \theta) P_\alpha(\cos \theta') \quad (\text{C.125})$$

cet ensemble de règles d'orthogonalité se traduit alors sous la forme :

$$W_{LL}^s + (2n + 1) W_{RLn}^s M_{sn}^{-+} + (2n + 1) W_{RLn}^{s,-s} M_{-s,sn}^{-+} = 0 \quad (C.126)$$

$$W_{LL}^{s,-s} + (2n + 1) W_{RLn}^s M_{s,-sn}^{-+} + (2n + 1) W_{RLn}^{s,-s} M_{-sn}^{-+} = 0 \quad (C.127)$$

$$(2n + 1)^2 W_{RLn}^s M_{sn}^{--} + (2n + 1)^2 W_{RLn}^{s,-s} M_{-s,s}^{--} = 1 \quad (C.128)$$

$$(2n + 1) W_{RLn}^s M_{s,-sn}^{--} + (2n + 1) W_{RLn}^{s,-s} M_{-s}^{--} = 0 \quad (C.129)$$

Pour obtenir les expressions des composantes  $M_{ijn}^{\alpha\beta}$ , il suffit d'utiliser l'un ou l'autre des deux ensembles de relations d'orthogonalité en se rappelant que :

$$W_{LL}^{s0} = W_{RR}^{s0} = R_s \quad W_{RL}^{s0} = W_{LR}^{s0} = T_s \quad (C.130)$$

$$W_{LR}^{s,-s0} = W_{RL}^{s,-s0} = W_{LR}^{-s,s0} = W_{RL}^{-s,s0} = T_{sf} \quad (C.131)$$

$$W_{LL}^{s,-s0} = W_{RR}^{s,-s0} = W_{LL}^{-s,s0} = W_{RR}^{-s,s0} = R_{sf} \quad (C.132)$$

et des relations identiques pour les taux d'ordre 1 en changeant T et R en t et r et en remplaçant chaque composante  $W^0$  par  $3W^1$ .

On aboutit donc aux expressions suivantes des composantes d'ordre zéro :

$$M_{s0}^{++} = T_s - \frac{R_s (R_s T_{-s} - T_{sf} R_{sf})}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} - \frac{R_{sf} (R_{sf} T_s - T_{sf} R_s)}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.133)$$

$$M_{s0}^{--} = \frac{T_{-s}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.134)$$

$$M_{s0}^{+-} = \frac{R_s T_{-s} - T_{sf} R_{sf}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.135)$$

$$M_{s0}^{-+} = \frac{R_{sf} T_{sf} - R_s T_{-s}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.136)$$

$$M_{\uparrow\downarrow 0}^{++} = T_{sf} - \frac{R_{sf} (R_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf} R_{sf})}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} - \frac{R_{\downarrow} (R_{sf} T_{\uparrow} - T_{sf} R_{\uparrow})}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.137)$$

$$M_{\uparrow\downarrow 0}^{--} = M_{\uparrow\downarrow 0}^{--} = -\frac{T_{sf}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.138)$$

$$M_{\uparrow\downarrow 0}^{+-} = -M_{\uparrow\downarrow 0}^{-+} = \frac{R_{sf} T_{\uparrow} - T_{sf} R_{\uparrow}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.139)$$

$$M_{\uparrow\downarrow 0}^{-+} = \frac{T_{sf} R_{\uparrow} - R_{sf} T_{\uparrow}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.140)$$

$$M_{\uparrow\downarrow 0}^{+-} = \frac{T_{sf} R_{\downarrow} - R_{sf} T_{\downarrow}}{T_{\uparrow} T_{\downarrow} - T_{sf}^2} \quad (C.141)$$

Les expressions des composantes d'ordre un se déduisent de ces expressions en substituant chaque coefficient de transmission T et de réflexion R par t et r et en changeant chaque composante  $M_0$  par  $3M_1$ .

### C.5.4 Equations d'interface macroscopiques

Les équations de collision relatives à la représentation matrice de transfert ont également leurs équivalents macroscopiques. On introduit alors la représentation matricielle :

$$\begin{bmatrix} n_{Rs}^+ \\ n_{Rs}^- \end{bmatrix} = M_{0s} \begin{bmatrix} n_{Ls}^+ \\ n_{Ls}^- \end{bmatrix} + M_{0s,-s} \begin{bmatrix} n_{L-s}^+ \\ n_{L-s}^- \end{bmatrix} \quad (\text{C.142})$$

$$\begin{bmatrix} J_{Rs}^+ \\ J_{Rs}^- \end{bmatrix} = \sigma_z M_{0s} \sigma_z \begin{bmatrix} J_{0Ls}^+ \\ J_{0Ls}^- \end{bmatrix} + M_{1s} \begin{bmatrix} J_{1Ls}^+ \\ J_{1Ls}^- \end{bmatrix} + \sigma_z M_{0s,-s} \sigma_z \begin{bmatrix} J_{0L-s}^+ \\ J_{0L-s}^- \end{bmatrix} + M_{1s,-s} \begin{bmatrix} J_{1L-s}^+ \\ J_{1L-s}^- \end{bmatrix} \quad (\text{C.143})$$

où l'on a posé

$$M_{0s} = \begin{pmatrix} M_{s0}^{++} & M_{s0}^{+-} \\ M_{s0}^{-+} & M_{s0}^{--} \end{pmatrix} \quad M_{0s,-s} = \begin{pmatrix} M_{s,-s0}^{++} & M_{s,-s0}^{+-} \\ M_{s,-s0}^{-+} & M_{s,-s0}^{--} \end{pmatrix} \quad (\text{C.144})$$

$$M_{1s} = \begin{pmatrix} 3M_{s1}^{++} & -3M_{s1}^{+-} \\ -3M_{s1}^{-+} & 3M_{s1}^{--} \end{pmatrix} \quad M_{1s,-s} = \begin{pmatrix} 3M_{s,-s1}^{++} & -3M_{s,-s1}^{+-} \\ -3M_{s,-s1}^{-+} & 3M_{s,-s1}^{--} \end{pmatrix} \quad (\text{C.145})$$

et l'on a introduit la matrice de Pauli :

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.146})$$

On notera enfin que la représentation matricielle retenue ici n'est pas unique. On peut en particulier regrouper les grandeurs macroscopiques par chiralité à la place du spin.

## Annexe D

# Annexe sur le transport CIP

### D.1 Projection de l'équation de Boltzmann sur les polynômes de Tchebychev

Pour projeter l'équation de Boltzmann 6.18 sur les polynômes de Tchebychev, il suffit d'injecter le développement :

$$g^\pm(z, v, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm(z, v, \theta) T_n\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) \quad (\text{D.1})$$

dans l'équation de Boltzmann. On obtient alors :

$$\begin{aligned} & \pm \cos \theta \sum_{n=0}^{+\infty} \partial_z g_n^\pm T_n\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) - eE \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{1}{\ell} \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm T_n\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right) \\ & + \frac{1}{4\pi\ell} \sum_{n=0}^{+\infty} \left( \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_n^+(\theta') + g_n^-(\theta')] \int_0^{2\pi} d\varphi' T_n\left(\cos \frac{\varphi'}{2}\right) \right) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

En effectuant le changement de variable  $\alpha = \frac{\varphi}{2}$  et en utilisant les propriétés des polynômes de Tchebychev, on constate alors que :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' T_n\left(\cos \frac{\varphi'}{2}\right) = 2\pi\delta_{n,0} \quad \cos \varphi = \cos 2\alpha = T_2(\cos \alpha) \quad (\text{D.3})$$

si bien que D.2 devient :

$$\pm \cos \theta \sum_{n=0}^{+\infty} \partial_z g_n^\pm T_n(\cos \alpha) - eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} T_2(\cos \alpha) = -\frac{1}{\ell} \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm T_n(\cos \alpha) + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \quad (\text{D.4})$$



l'angle  $\alpha$  appartient à présent à l'intervalle  $[0, \pi]$ . On projette ensuite cette équation en la multipliant par  $T_m(\cos \alpha)$  et en intégrant sur l'angle  $\alpha$  :

$$\begin{aligned} & \pm \cos \theta \sum_{n=0}^{+\infty} \partial_z g_n^\pm \int_0^\pi d\alpha T_m(\cos \alpha) T_n(\cos \alpha) - eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \int_0^\pi d\alpha T_m(\cos \alpha) T_2(\cos \alpha) \\ &= -\frac{1}{\ell} \sum_{n=0}^{+\infty} g_n^\pm \int_0^\pi d\alpha T_m(\cos \alpha) T_n(\cos \alpha) + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \int_0^\pi d\alpha T_m(\cos \alpha) \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

En utilisant alors les propriétés d'orthogonalité, on aboutit à l'équation :

$$\begin{aligned} & \pm \cos \theta \sum_{n=0}^{+\infty} \gamma_n \partial_z g_n^\pm \delta_{m,n} - \frac{\pi}{2} eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \delta_{m,2} = -\frac{1}{\ell} \sum_{n=0}^{+\infty} \gamma_n g_n^\pm \delta_{m,n} \\ & + \frac{\pi}{2\ell} \delta_{m,0} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

où  $\gamma_n = \pi$  si  $n = 0$  et  $\gamma_n = \frac{\pi}{2}$  si  $n \neq 0$ . En spécifiant alors des valeurs de  $m$ , on obtient l'ensemble d'équations suivant :

-  $m = 0$  :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_0^+ = -\frac{g_0^+}{\ell} + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \\ -\cos \theta \partial_z g_0^- = -\frac{g_0^-}{\ell} + \frac{1}{2\ell} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' [g_0^+(\theta') + g_0^-(\theta')] \end{cases} \quad (\text{D.7})$$

-  $m = 2$  :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_2^+ + \frac{g_2^+}{\ell} = eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \\ -\cos \theta \partial_z g_2^- + \frac{g_2^-}{\ell} = eE \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \end{cases} \quad (\text{D.8})$$

-  $m = 1$  ou  $m \geq 3$  :

$$\begin{cases} \cos \theta \partial_z g_m^+ + \frac{g_m^+}{\ell} = 0 \\ -\cos \theta \partial_z g_m^- + \frac{g_m^-}{\ell} = 0 \end{cases} \quad (\text{D.9})$$

qui sont les équations présentées dans le chapitre principal.

## D.2 Projection des conditions d'interfaces

Compte tenu des définitions des coefficients de réflexion et de transmission (relations 6.59 et 6.60), les conditions d'interfaces 6.55 et 6.56 s'écrivent donc :

$$g_{2t}^+ = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' R(\theta, \theta') g_{2t}^-(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' T(\theta, \theta') g_{2b}^+(\theta') \quad (\text{D.10})$$

$$g_{2b}^- = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' R(\theta, \theta') g_{2b}^+(\theta') + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin \theta' T(\theta, \theta') g_{2t}^-(\theta') \quad (\text{D.11})$$

Pour projeter ces équations, il suffit alors d'injecter les expressions des fonctions de distribution 6.32 et 6.33,

$$g_{2i}^+(z, \theta) = eE \ell_i \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^+(\theta) e^{-\frac{(z-\alpha_i)}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (\text{D.12})$$

$$g_{2i}^-(z, \theta) = eE\ell_i \sin \theta \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( 1 - B_i^-(\theta) e^{\frac{(z-\alpha_{i+1})}{\ell_i \cos \theta}} \right) \quad (\text{D.13})$$

où l'on rappelle que  $\alpha_i$  désigne la coordonnée du bord inférieur de la couche et  $\alpha_{i+1}$  celle du bord supérieur, ainsi que les développements des fonctions  $F^\pm$  (relation 6.34) et des coefficients de réflexion et transmission (expressions 6.61 et 6.62) :

$$B^\pm(\theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) B_n^\pm \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (\text{D.14})$$

$$R(\theta, \theta') = \sin \theta \sin \theta' \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 R_m(\epsilon) \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_m(\cos \theta') \quad (\text{D.15})$$

$$T(\theta, \theta') = \sin \theta \sin \theta' \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 T_m(\epsilon) \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_m(\cos \theta') \quad (\text{D.16})$$

Pour expliquer la méthode de projection, nous présentons la technique sur l'équation D.10. En injectant les expressions des fonctions de distribution et les développements des taux de réflexion et de transmission dans cette équation, on obtient :

$$\begin{aligned} 1 - B_t^+(\theta) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin^3 \theta' \left( \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 R_m(\epsilon) \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_m(\cos \theta') \right) \left( 1 - B_t^- e^{-\frac{1}{\kappa_t \cos \theta'}} \right) \\ &+ \eta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin^3 \theta' \left( \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 T_m(\epsilon) \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_m(\cos \theta') \right) \left( 1 - B_b^+ e^{-\frac{1}{\kappa_b \cos \theta'}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

où  $\kappa_t$  et  $\kappa_b$  désignent les nombres de Knudsen des couches au dessus et en dessous de l'interface ( $\kappa = \frac{\ell}{\Delta}$ ) et  $\eta = \frac{\ell_b}{\ell_t}$  est le rapport des libres parcours moyen. Chaque intégrale se décompose alors en deux parties, une partie liée au facteur 1 et l'autre au facteur exponentielle proportionnelle aux fonctions  $F^\pm$ . Le traitement des deux intégrales étant similaire, nous détaillons les calculs pour la première (avec le taux de réflexion).

La première partie de l'intégrale se simplifie en remarquant que le terme  $\sin^3 \theta$  peut se décomposer sur la base des polynômes de Legendre décalés sous la forme :

$$\sin^3 \theta = \sin \theta \left[ \frac{2}{3} \bar{P}_0 - \frac{1}{2} \bar{P}_1(\cos \theta) - \frac{1}{6} \bar{P}_2(\cos \theta) \right] \quad (\text{D.18})$$

on a alors :

$$\begin{aligned} &\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin^3 \theta' \left( \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 R_m(\epsilon) \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_m(\cos \theta') \right) \\ &= \frac{2}{3} R_0 \bar{P}_0 - \frac{3}{2} R_1 \bar{P}_1(\cos \theta) - \frac{5}{6} R_2 \bar{P}_2(\cos \theta) \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

où l'on a utilisé la relation d'orthogonalité :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_\mu(\cos \theta) \bar{P}_\nu(\cos \theta) = \frac{\delta_{\mu,\nu}}{(2\mu+1)} \quad (\text{D.20})$$

La seconde contribution s'écrit simplement :

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta' \sin^3 \theta' \left( \sum_{m=0}^{+\infty} (2m+1)^2 R_n(\epsilon) \bar{P}_n(\cos \theta) \bar{P}_n(\cos \theta') \right) B_t^- e^{-\frac{1}{\kappa_t \cos \theta'}} \\ &= \sum_{m,j} (2m+1)^2 (2j+1) R_m B_j^- \psi_{mj} \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) \bar{P}_m(\cos \theta) \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

avec

$$\psi_{mj}(x) = \psi_{jm}(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin^3 \theta \bar{P}_m(\cos \theta) \bar{P}_j(\cos \theta) e^{-\frac{x}{\cos \theta}} \quad (\text{D.22})$$

qui, comme les fonctions  $\psi_n$  intervenant dans les profils des grandeurs moyennes, s'écrit comme une combinaison d'exponentielle intégrale.

En utilisant les résultats D.19 et D.21 dans l'équation D.17, on obtient :

$$\begin{aligned} 1 - \sum_m (2m+1) B_{tm}^+ \bar{P}_m &= \left[ \frac{2}{3} (R_0 + \eta T_0) \bar{P}_0 - \frac{3}{2} (R_1 + \eta T_1) \bar{P}_1 - \frac{5}{6} (R_2 + \eta T_2) \bar{P}_2 \right] \\ - \sum_{m,j} (2m+1)^2 (2j+1) &\left[ R_m \psi_{mj} \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) B_{tj}^- + \eta T_m \psi_{mj} \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) B_{bj}^+ \right] \bar{P}_m \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

où l'on a ommis la variable  $\theta$  dans les polynômes pour plus de légèreté. En multipliant enfin cette équation par

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sin \theta \bar{P}_n(\cos \theta) \quad (\text{D.24})$$

et en utilisant la propriété d'orthogonalité D.20, on obtient le résultat cherché :

$$\begin{aligned} B_{tn}^+ &= \left[ 1 - \frac{2}{3} (R_0 + \eta T_0) \delta_{n,0} + \frac{1}{2} (R_1 + \eta T_1) \delta_{n,1} + \frac{1}{6} (R_2 + \eta T_2) \delta_{n,2} \right] \\ &+ (2n+1) \sum_{j=0}^{+\infty} (2j+1) \left[ R_n \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_t} \right) B_{tj}^- + \eta T_n \psi_{nj} \left( \frac{1}{\kappa_b} \right) B_{bj}^+ \right] \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

Le traitement de la seconde équation d'interface D.11 s'effectue de la même façon.

### D.3 L'exponentielle intégrale

La fonction exponentielle intégrale est définie pour tout entier  $n$  positif par la relation intégrale :

$$E_n(x) = \int_1^{+\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt \quad x > 0 \quad (\text{D.26})$$

Elle satisfait les relations de récurrence :

$$E_n(x) = \frac{1}{n-1} [e^{-x} - x E_{n-1}(x)] \quad n \neq 1 \quad (\text{D.27})$$

$$\frac{dE_n(x)}{dx} = -E_{n-1}(x) \quad (\text{D.28})$$

La valeur pour  $x = 0$  est donnée par la relation très simple :

$$E_n(0) = \frac{1}{n-1} \quad n \neq 1 \quad (\text{D.29})$$

La fonction  $E_1$  admet le développement en série :

$$E_1(x) = -\gamma - \ln(x) + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{nn!} \quad (\text{D.30})$$

où  $\gamma \approx 0.58$  est la constante d'Euler-Mascheroni.

## D.4 Expression des fonctions $\psi$

Les expressions des fonctions  $\psi$  intervenant dans la détermination des trois premières composantes  $f_{1,2,3}^{\pm}$  sont :

$$\psi_{00}(x) = E_2(x) - E_4(x) \quad (\text{D.31})$$

$$\psi_{01}(x) = \psi_{10}(x) = 2(E_3(x) - E_5(x)) - \psi_{00}(x) \quad (\text{D.32})$$

$$\psi_{11}(x) = 4(E_4(x) - E_6(x)) - 2\psi_{01}(x) - \psi_{00}(x) \quad (\text{D.33})$$

$$\psi_{02}(x) = \psi_{20}(x) = 6(E_4(x) - E_6(x)) - 6(E_3(x) - E_5(x)) + (E_2(x) - E_4(x)) \quad (\text{D.34})$$

$$\psi_{12}(x) = \psi_{21}(x) = 12(E_5(x) - E_7(x)) - 18(E_4(x) - E_6(x)) + 8(E_3(x) - E_5(x)) - (E_2(x) - E_4(x)) \quad (\text{D.35})$$

$$\psi_{22}(x) = 36(E_6(x) - E_8(x)) - 72(E_5(x) - E_7(x)) + 48(E_4(x) - E_6(x)) - 12(E_3(x) - E_5(x)) + (E_2(x) - E_4(x)) \quad (\text{D.36})$$

## D.5 Polarisation en spin

En présence de spin, la conductivité intégrée s'écrit à l'ordre deux :

$$\frac{\sigma_{is}}{\sigma_{dis}\Delta_i} = 1 - \frac{3\kappa_{is}}{4} \left[ \begin{array}{l} C_{0s} \left( \frac{1}{4} - \phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) \right) + C_{1s} \left( \frac{1}{20} - 6\phi_1 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) - 3\phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) \right) \\ - C_{2s} \left( \frac{1}{4} + 30\phi_2 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) - 30\phi_1 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) + 5\phi_0 \left( \frac{1}{\kappa_{is}} \right) \right) \end{array} \right] \quad (\text{D.37})$$

avec  $C_{is} = B_{is}^+ + B_{is}^-$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Le nombre de Knudsen étant simplement donné par :

$$\kappa_s = \frac{\lambda_s}{\Delta} \quad (\text{D.38})$$

Les constantes  $B_s^\pm$  sont alors données par les équations d'interfaces écrites sous forme matricielle :

$$\begin{aligned} [B_{t,s}^+] &= V_{1s} + [R_s] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{t,s}} \right) \right] [B_{t,s}^-] + p_{ts} [R_{sf}] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{t,-s}} \right) \right] [B_{t,-s}^-] \\ &+ \eta_s [T_s] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{b,s}} \right) \right] [B_{b,s}^+] + p_{ts} \eta_{-s} [T_{sf}] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{b,-s}} \right) \right] [B_{b,-s}^+] \end{aligned} \quad (\text{D.39})$$

$$\begin{aligned} [B_{b,s}^-] &= V_{2s} + [R_s] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{b,s}} \right) \right] [B_{b,s}^+] + p_{bs} [R_{sf}] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{b,-s}} \right) \right] [B_{b,-s}^+] \\ &+ \frac{1}{\eta_s} [T_s] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{t,s}} \right) \right] [B_{t,s}^-] + \frac{p_{bs}}{\eta_{-s}} [T_{sf}] \left[ \psi \left( \frac{1}{\kappa_{t,-s}} \right) \right] [B_{t,-s}^-] \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

avec

$$p_{\alpha s} = \frac{\lambda_{\alpha,-s}}{\lambda_{\alpha,s}} \quad \alpha = t, b \quad (\text{D.41})$$

$$\eta_s = \frac{\lambda_{b,s}}{\lambda_{t,s}} \quad (\text{D.42})$$

Les vecteurs  $V_{1s}$  et  $V_{2s}$  s'écrivent alors

$$V_{1s} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3} (R_{0s} + p_{ts} R_{0sf} + \eta_s T_{0s} + p_{ts} \eta_{-s} T_{0sf}) \\ \frac{1}{2} (R_{1s} + p_{ts} R_{1sf} + \eta_s T_{1s} + p_{ts} \eta_{-s} T_{1sf}) \\ \frac{1}{6} (R_{2s} + p_{ts} R_{2sf} + \eta_s T_{2s} + p_{ts} \eta_{-s} T_{2sf}) \end{pmatrix} \quad (\text{D.43})$$

$$V_{2s} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3} \left( R_{0s} + p_{bs} R_{0sf} + \frac{T_{0s}}{\eta_s} + \frac{p_{sb}}{\eta_{-s}} T_{0sf} \right) \\ \frac{1}{2} \left( R_{1s} + p_{bs} R_{1sf} + \frac{T_{1s}}{\eta_s} + \frac{p_{sb}}{\eta_{-s}} T_{1sf} \right) \\ \frac{1}{6} \left( R_{2s} + p_{bs} R_{2sf} + \frac{T_{2s}}{\eta_s} + \frac{p_{sb}}{\eta_{-s}} T_{2sf} \right) \end{pmatrix} \quad (\text{D.44})$$

Les autres matrices étant identiques à celles introduites dans le paragraphe 6.2.5.

# Annexe E

## Annexe de la méthode variationnelle

### E.1 Etablissement de la transformation du modèle

Définissons deux nouvelles fonctions  $g_1^+$  et  $g_1^-$  de sorte que les fonctions de distribution exactes s'écrivent comme une combinaison linéaire de celles-ci. On peut donc écrire :

$$g^+(z) = a_1 g_1^+(z) + b_1 g_1^-(z) \quad (\text{E.1})$$

$$g^-(z) = a_2 g_1^+(z) + b_2 g_1^-(z) \quad (\text{E.2})$$

Pour déterminer ces nouvelles fonctions et les paramètres de changement de base  $a_i$  et  $b_i$  ( $i = 1, 2$ ), commençons par écrire les conditions de bords en termes de ces nouvelles fonctions. On obtient alors :

$$\begin{cases} (a_1 - a_2 R_1) g_1^+(-a) + (b_1 - b_2 R_1) g_1^-(-a) = 0 \\ (a_2 - a_1 R_2) g_1^+(a) + (b_2 - b_1 R_2) g_1^-(a) = 0 \end{cases} \quad (\text{E.3})$$

L'idée étant de faire disparaître les coefficients de réflexion aux bords du domaine, choisissons donc les nouvelles fonctions de distribution de sorte qu'elles vérifient les conditions de bords du modèle de Fuchs-Sondheimer de réflexions nulles. On pose donc

$$g_1^+(-a) = 0 \quad \text{et} \quad g_1^-(a) = 0 \quad (\text{E.4})$$

fournissant ainsi une première contrainte sur les paramètres du changement de base puisque l'utilisation de ces nouvelles conditions de bords dans les équations E.3 conduit naturellement aux relations :

$$\begin{cases} b_1 - R_1 b_2 = 0 \Rightarrow b_1 = R_1 b_2 \\ a_2 - R_2 a_1 = 0 \Rightarrow a_2 = R_2 a_1 \end{cases} \quad (\text{E.5})$$

pour que le problème soit bien posé. En injectant ces contraintes dans les relations E.1 et E.2, on obtient donc :

$$g^+(z) = a_1 g_1^+(z) + R_1 b_2 g_1^-(z) \quad (\text{E.6})$$

$$g^-(z) = R_2 a_1 g_1^+(z) + b_2 g_1^-(z) \quad (\text{E.7})$$

L'injection de ces deux relations dans les équations de Boltzmann conduit à :

$$\begin{cases} a_1 v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} + R_1 b_2 v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{a_1}{\tau} g_1^+ + \frac{R_1 b_2}{\tau} g_1^- = \frac{1}{\tau} & \text{equ1} \\ -R_2 a_1 v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} - b_2 v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{R_2 a_1}{\tau} g_1^+ + \frac{b_2}{\tau} g_1^- = \frac{1}{\tau} & \text{equ2} \end{cases} \quad (\text{E.8})$$

On souhaite écrire deux équations différentielles ne faisant intervenir qu'une seule dérivée dans chacune d'elles. Pour cela, il suffit de combiner judicieusement les deux équations précédentes. En particulier, la combinaison  $\text{equ1} + R_1 \text{equ2}$  donne :

$$v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_1 R_2)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^+ + \frac{1}{\tau} \frac{2R_1 b_2}{a_1(1 - R_1 R_2)} g_1^- = \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_1)}{a_1(1 - R_1 R_2)} \quad (\text{E.9})$$

et la combinaison  $\text{equ2} + R_2 \text{equ1}$  fournit :

$$-v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_1 R_2)}{(1 - R_1 R_2)} g_1^- + \frac{1}{\tau} \frac{2R_2 a_1}{b_2(1 - R_1 R_2)} g_1^+ = \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_2)}{b_2(1 - R_1 R_2)} \quad (\text{E.10})$$

Il ne reste enfin qu'à fixer les deux paramètres  $a_1$  et  $b_2$ . Ce choix est quelque peu arbitraire et nous les choisissons de manière à simplifier les termes de droite du signe égal. On pose donc :

$$a_1 = \frac{(1 + R_1)}{(1 - R_1 R_2)} \quad \text{et} \quad b_2 = \frac{(1 + R_2)}{(1 - R_1 R_2)} \quad (\text{E.11})$$

terminant ainsi la construction du changement de base défini par les relations E.1 et E.2.

### Bilan et interprétation

Finalement, on constate que les nouvelles fonctions de distributions  $g_1^+$  et  $g_1^-$  vérifient un système d'équations différentielles couplées du premier ordre défini par :

$$v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} + \frac{g_1^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^-}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \quad (\text{E.12})$$

$$-v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{g_1^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^+}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \quad (\text{E.13})$$

munies des conditions de bords

$$g_1^+(-a) = 0 \quad \text{et} \quad g_1^-(a) = 0 \quad (\text{E.14})$$

et dont les temps de relaxation sont définis par :

$$\frac{1}{\tau_{eq}} = \frac{1}{\tau} \frac{(1 + R_1 R_2)}{(1 - R_1 R_2)} \quad \frac{1}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \frac{2R_1(1 + R_2)}{(1 - R_1 R_2)(1 + R_1)} \quad \frac{1}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \frac{2R_2(1 + R_1)}{(1 - R_1 R_2)(1 + R_2)} \quad (\text{E.15})$$

## E.2 Solutions exactes des équations de la nouvelle représentation 206

Les fonctions de distributions  $g^+$  et  $g^-$  sont liées aux fonctions  $g_1^+$  et  $g_1^-$  par les relations de changement de base :

$$g^+(z) = \frac{(1+R_1)}{(1-R_1R_2)}g_1^+(z) + \frac{R_1(1+R_2)}{(1-R_1R_2)}g_1^-(z) \quad (\text{E.16})$$

$$g^-(z) = \frac{R_2(1+R_1)}{(1-R_1R_2)}g_1^+(z) + \frac{(1+R_2)}{(1-R_1R_2)}g_1^-(z) \quad (\text{E.17})$$

## E.2 Solutions exactes des équations de la nouvelle représentation

Dans cette section, on calcul les solutions exactes du modèle dans la nouvelle représentation définie par les équations 7.22, 7.23 et 7.24 dont on rappelle les expressions :

$$v_z \frac{\partial g_1^+}{\partial z} + \frac{g_1^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^-}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \quad (\text{E.18})$$

$$-v_z \frac{\partial g_1^-}{\partial z} + \frac{g_1^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_1^+}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \quad (\text{E.19})$$

munies des conditions de bords

$$g_1^+(-a) = 0 \quad \text{et} \quad g_1^-(a) = 0 \quad (\text{E.20})$$

Pour résoudre ces équations, on décompose les fonctions de distribution sous la forme :

$$g_1^\pm(z) = g_C^\pm + g_S^\pm(z) \quad (\text{E.21})$$

Où  $g_C^\pm$  sont des fonctions constantes indépendantes de  $z$  et définie par le système d'équations :

$$\begin{cases} \frac{g_C^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_C^-}{\tau_1} = \frac{1}{\tau} \\ \frac{g_C^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_C^+}{\tau_2} = \frac{1}{\tau} \end{cases} \quad (\text{E.22})$$

et  $g_S^\pm$  sont des fonctions de  $z$  vérifiant :

$$\begin{cases} v_z \frac{\partial g_S^+}{\partial z} + \frac{g_S^+}{\tau_{eq}} + \frac{g_S^-}{\tau_1} = 0 \\ -v_z \frac{\partial g_S^-}{\partial z} + \frac{g_S^-}{\tau_{eq}} + \frac{g_S^+}{\tau_2} = 0 \end{cases} \quad (\text{E.23})$$

Les parties constantes vérifient donc un système d'équations algébriques dont les solutions s'écrivent :

$$g_C^+ = \frac{\tau_2 \tau_{eq} (\tau_1 - \tau_{eq})}{\tau_1 \tau_2 - \tau_{eq}^2} = \frac{(1-R_1)}{(1+R_1)} \quad (\text{E.24})$$



## E.2 Solutions exactes des équations de la nouvelle représentation 207

$$g_C^- = \frac{\tau_1 \tau_{eq} (\tau_2 - \tau_{eq})}{\tau_1 \tau_2 - \tau_{eq}^2} = \frac{(1 - R_2)}{(1 + R_2)} \quad (\text{E.25})$$

où les secondes expressions ont été obtenues en utilisant les expressions 7.25 de  $\tau_{eq}$ ,  $\tau_1$  et  $\tau_2$  en fonction des coefficients de réflexions.

Les composantes  $g_S^\pm$  s'obtiennent en découplant les équations E.23. En particulier, celle concernant  $g_S^+$  s'écrit :

$$v_z^2 \frac{\partial^2 g_S^+}{\partial z^2} - \left( \frac{1}{\tau_{eq}^2} - \frac{1}{\tau_1 \tau_2} \right) g_S^+ = 0 \quad (\text{E.26})$$

On constate alors que :

$$\frac{1}{\tau_{eq}^2} - \frac{1}{\tau_1 \tau_2} = \frac{1}{\tau^2} \quad (\text{E.27})$$

et  $g_S^+$  s'écrit :

$$g_S^+ = \lambda_1 e^{-\frac{z}{\ell \cos \theta}} + \lambda_2 e^{\frac{z}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.28})$$

où  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont deux constantes d'intégration.

En injectant alors cette solution dans les équations E.23, on trouve l'expression de  $g_S^-$  :

$$g_S^- = \lambda_1 \left( \frac{\tau_1}{\tau} - \frac{\tau_1}{\tau_{eq}} \right) e^{-\frac{z}{\ell \cos \theta}} - \lambda_2 \left( \frac{\tau_1}{\tau} + \frac{\tau_1}{\tau_{eq}} \right) e^{\frac{z}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.29})$$

En appliquant ensuite les conditions de bords et en remarquant que :

$$\frac{\tau_1}{\tau} - \frac{\tau_1}{\tau_{eq}} = -R_2 \frac{(1 + R_1)}{(1 + R_2)} \quad \frac{\tau_1}{\tau} + \frac{\tau_1}{\tau_{eq}} = \frac{(1 + R_1)}{R_1 (1 + R_2)} \quad (\text{E.30})$$

on détermine les expressions de  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  :

$$\lambda_1 = - \frac{\left[ (1 - R_1) + R_1 (1 - R_2) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_1) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{-\frac{a}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.31})$$

$$\lambda_2 = \frac{R_1 \left[ (1 - R_2) + R_2 (1 - R_1) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_1) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{-\frac{a}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.32})$$

Ainsi, les fonctions de distributions  $g_1^+$  et  $g_1^-$  s'écrivent :

$$g_1^+ = \frac{(1 - R_1)}{(1 + R_1)} - \frac{\left[ (1 - R_1) + R_1 (1 - R_2) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_1) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{-\frac{(z+a)}{\ell \cos \theta}} + \frac{R_1 \left[ (1 - R_2) + R_2 (1 - R_1) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_1) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{\frac{z-a}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.33})$$

$$g_1^- = \frac{(1 - R_2)}{(1 + R_2)} + \frac{R_2 \left[ (1 - R_1) + R_1 (1 - R_2) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_2) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{-\frac{(z+a)}{\ell \cos \theta}} - \frac{\left[ (1 - R_2) + R_2 (1 - R_1) e^{-\frac{1}{\kappa \cos \theta}} \right]}{(1 + R_2) \left( 1 - R_1 R_2 e^{-\frac{2}{\kappa \cos \theta}} \right)} e^{\frac{z-a}{\ell \cos \theta}} \quad (\text{E.34})$$

On constate alors qu'en utilisant les relations de changement de représentation 7.20 et 7.21, on retrouve les expressions 7.8 et 7.9 des fonctions de distribution du modèle standard.

### E.3 Calcul des fonctions de Green

Dans le développement itératif des fonctions de distribution, les fonctions de Green  $G^+$  et  $G^-$  sont données par l'équations 7.33 qu'on rappelle ici :

$$\pm v_f \cos \theta \frac{\partial G^\pm(z, z')}{\partial z} + \frac{G^\pm(z, z')}{\tau_{eq}} = \delta(z - z') \quad (\text{E.35})$$

munies des conditions de bords  $G^\pm(\mp a, z') = 0$ . On présente dans ce paragraphe le calcul de  $G^+$ .

Cette fonction de Green s'écrit sous la forme :

$$G^+(z, z') = G^+_{>}(z, z')\Theta(z - z') + G^+_{<}(z, z')\Theta(z' - z) \quad (\text{E.36})$$

où  $\Theta$  est la fonction de Heaviside.

En injectant cette relation dans E.35, on obtient :

$$v_f \cos \theta \frac{\partial G^+_{>}(z, z')}{\partial z} + \frac{G^+_{>}(z, z')}{\tau_{eq}} = 0 \Rightarrow G^+_{>}(z, z') = \lambda_{>}(z') e^{-\frac{z}{\ell_{eq} \cos \theta}} \quad (\text{E.37})$$

$$v_f \cos \theta \frac{\partial G^+_{<}(z, z')}{\partial z} + \frac{G^+_{<}(z, z')}{\tau_{eq}} = 0 \Rightarrow G^+_{<}(z, z') = \lambda_{<}(z') e^{-\frac{z}{\ell_{eq} \cos \theta}} \quad (\text{E.38})$$

avec la condition de saut en  $z = z'$  :

$$G^+_{>}(z = z') - G^+_{<}(z = z') = \frac{1}{v_f \cos \theta} \quad (\text{E.39})$$

La condition de bord s'applique nécessairement à la fonction  $G^+_{<}$ , soit :

$$G^+(a, z') = 0 \Rightarrow G^+_{<}(a, z') = 0 \Rightarrow \lambda_{<} = 0 \Rightarrow G^+_{<}(z, z') = 0 \quad \forall z, z' \quad (\text{E.40})$$

La condition de saut donne alors l'expression de  $G^+_{>}$  :

$$G^+_{>}(z, z') = \frac{1}{v_f \cos \theta} e^{\frac{z' - z}{\ell_{eq} \cos \theta}} \quad (\text{E.41})$$

On trouve ainsi l'expression 7.39 de la fonction de Green  $G^+$  :

$$G^+(z, z') = \begin{cases} 0 & -a \leq z < z' \\ \frac{1}{v_f \cos \theta} \exp\left(\frac{(z' - z)}{\ell_{eq} \cos \theta}\right) & z' \leq z \leq a \end{cases} \quad (\text{E.42})$$

La fonction de Green  $G^-$  s'obtient le même type de calcul mais on peut l'obtenir directement en appliquant la symétrie d'inversion ( $z \rightarrow -z$ ) à la fonction de Green  $G^+$ . On aboutit alors à l'expression 7.40 de  $G^-$ .

# Bibliographie

## Transport CPP

- [1] D. Vasileska et Al, Semiconductor Device Modeling, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience Vol.5, 132 (2008)
- [2] V. K. Dugaev; V. I. Litinov, Electrical current transmission through the contact of two metals, PRB 52, No 7 (1995)
- [3] Z. L. Zhi; W. Z. Chuan, Analytical solution of the Boltzmann Poisson equation and its application to MIS tunneling junctions, Chinese Physics B, Vol 18, No 7 (2009)
- [4] L. sheng et Al, Semiclassical transport theory of inhomogeneous systems PRB 53, No 13, 8203-8206 (1996)
- [5] S. P. Chen; C. R. Chang, Analytic solutions of the linear Boltzmann transport equation for multilayered systems, Physical Review B 72, 064445 (2005)
- [6] D. R. Penn; M. D. Stiles, Solution of the Boltzmann equation without the relaxation time approximation, PRB 59, No 20, 13338-13346 (1999)
- [7] S. Zhang; P. M. Levy, Conductivity perpendicular to the plane of multilayered structures, J. Appl. Phys 69 (8) (1991)
- [8] M. Büttiker et Al, Generalized many-channel conductance formula with application to small rings, PRB 31, No 10, 6207-6215 (1985)
- [9] M. Büttiker, Role of quantum coherence in series resistors, PRB Vol 33, No 5 (1986)
- [10] M. Büttiker, Four-Terminal Phase-Coherent Conductance, PRL 57, No 14 (1986)
- [11] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957)
- [12] R. Landauer, Philos. Mag. 21, 863 (1970)
- [13] Y. Imry; R. Landauer, Conductance viewed as transmission, Reviews of Modern Physics, Vol. 71, No 2 (1999)
- [14] A. Kamenev; W. Kohn, Landauer conductance without two chemical potentials, PRB 63, 155304 (2001)
- [15] D. S. Fisher; P. A. Lee, Relation between conductivity and transmission matrix, PRB 23, No 12, 6851-6854 (1981)
- [16] Y. Imry et R. Landauer, Conductance viewed as transmission, Rev. Mod. Phys, Vol 71, No 2 (1999)
- [17] R. Landauer, Residual Resistivity Dipoles, Z. Physik B 21, 247-254 (1975)

- 
- [18] E. Castano ; G. Kirczenow, Theory of the conductance of parallel ballistic constrictions, PRB Vol 41, No 8 (1990)
- [19] Y.N. Qi ; S. Zhang, Crossover from diffusive to ballistic transport properties in magnetic multilayers, PRB 65, 214407 (2002)
- [20] S. Borlenghi et Al, Multiscale approach to spin transport in magnetic multilayers, PRB 84, 035412 (2011)
- [21] V.S. Rychkov et Al, Spin torque and Waviness in Magnetic Multilayers : A Bridge between Valet-Fert Theory and Quantum Approaches, PRL 103, 066602 (2009)
- [22] C. W. J. Beenakker, Random-matrix theory of quantum transport, Rev Mod Phys, Vol. 69, No. 3 (1997)
- [23] M. J. M. de Jong, Transition from Sharvin to Drude resistance in high-mobility wires, PRB 49, No 11, 7778-7781 (1994)
- [24] D. Csontos ; S. E. Ulloa, crossover from diffusive to quasi-ballistic transport, J. App. Phys 101, 033711 (2007)
- [25] G. Mugnaini ; G. Iannaccone, Physics-based compact model of nanoscale MOSFETS Part I : transition from drift-diffusion to ballistic transport, IEEE transactions on electron devices, Vol 52, No 8 (2005)
- [26] R. Lipperheide ; U. Wille, Unified description of ballistic and diffusive carrier transport in semiconductor structures, PRB 68, 115315 (2003)
- [27] , R. Vlutters et Al, Modeling of spin dependent hot-electron transport in the spin valve transistor, PRB 65, 024416 (2001)
- [28] S. Sanvito et Al, Cross-over between the ballistic and the diffusive regime of the spin-conductance and giant magnetoresistance in magnetic multilayered nanostructures, PRB 60, No 10 (1999)
- [29] J. P. McKelvey ; J. C. Balogh, Flux Methods for Analysis of Transport Problems in Semiconductors in the Presence of Electric Fields, PR 137, No 5A (1965)
- [30] J. P. McKelvey et Al, Alternative Approach to the solution of added carrier transport problems in semiconductors, PR 123, No 1 (1961)
- [31] E. F. Pulver ; J. P. McKelvey, Flux methods for transport problems in solids with nonconstant electric fields, PR 149, No 2 (1966)
- [32] W. V. Roosbroeck, The transport of added current carriers in a homogeneous semiconductor, PR 91, No 2 (1953)
- [33] J. P. McKelvey, Analysis of semiconductor p-n junctions and junction devices by a flux method, J. Appl. Phys 33, No 3 (1962)
- [34] W. Shockley, Diffusion and drift of minority carriers in semiconductors for comparable capture and scattering mean free paths, PR 125, No 5 (1962)
- [35] J. W. Coltman et Al, Physical properties of calcium tungstate X-ray screens, J. Appl. Phys 18, 530-544 (1947)
- [36] M. A Alam et Al, A small signal, one flux analysis of short base transport, Solid state electronics Vol 38, No 1, 177-182 (1995)
- [37] M. Vaidyanathan ; D. L. Pulfrey, An appraisal of the one-flux method for treating carrier transport in modern semiconductor devices, Solid state electronics Vol 39, No 6, 827-832 (1996)

- [38] F. Assad et Al, The drift-diffusion equation revisited, *solid state electronics* Vol 42, No 3, 283-295 (1998)
- [39] G. Gildenblat, One flux theory of a nonabsorbing barrier, *J. Appl. Phys* 91, No 12 (2002)
- [40] J. H. Rhew ; M .S. Lunstrom, Drift diffusion equation for ballistic transport in nanoscale metal oxide semi-conductor field effect transistors, *J. Appl. Phys* 92, No 9 (2002)
- [41] D. Jiménez et Al, Unified compact model for the ballistic quantum wire quantum well metal-oxide semiconductor field effect transistor, *J. Appl. Phys* 94, No 2 (2003)
- [42] W. R. McKinnon, Fokker-Planck approach to extending the one-flux method of carrier transport in semiconductors to variable energies, *J. Appl. phys* 94, No 8 (2003)
- [43] Jérôme Saint-Martin, Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de Mosfet ultracourts à grille multiple sur SOI. 196 p. Thèse de Doctorat, Université de Paris-Sud Orsay. 2005
- [44] Sébastien Martinie, Modélisation du transport quasi-balistique pour la simulation de circuits à base de nano-transistors multigrilles [En ligne]. 194 p. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille.
- [45] Kausar Bano, Direct Solution of The Boltzmann transport equation in nanoscale Si devices. 136 p, Faculty of Purdue University (2000)
- [46] Ramesh Venugopal, Modeling quantum transport in nanoscale transistors [En ligne]. 171 p. Thèse de Doctorat, Faculty of Purdue University (2003)
- [47] G.D. Mahan, Quantum transport equation for electric and magnetic fields, *Physics Reports (Review Section Letters)* 145, No 5 (1987), 251-318
- [48] M. J. McLennan et Al, Voltage drop in mesoscopic systems : numerical study using a quantum kinetic equation, *PRB* 43, No 17 (1991)
- [49] P. M. Haney et Al, Ab initio giant magnetoresistance and current-induced torques in Cr/Au/Cr multilayers, *PRB* 75, 174428 (2007)
- [50] N. Charpentier et J. Clérouin, Ab initio simulations of the liquid alloy Au-Cs, *PRB* 78, 100202(R) (2008)
- [51] G. Placzek, The Angular Distribution of Neutrons Emerging from a Plane Surface, *PR* 72, No 7 (1947)
- [52] T. H. Berlin, Note on the Milne Problem for a Sphere, *PR* 73, No 5 (1948)
- [53] J. Lecaine, Application of a Variational Method to Milne's Problem, *PR* 72, No 7 (1947)
- [54] C. Mark, The Neutron Density Near a Plane Surface, *PR* 72, No 7 (1947)
- [55] R. E. Marshak, The Variational Method for Asymptotic Neutron Densities, *PR* 71, No 10 (1947)
- [56] R. E. Marshak, Note on the Spherical Harmonic Method As Applied to the Milne Problem for a Sphere, *PR* 71, No 7 (1947)
- [57] G. Placzek ; W. Seidel, Milne's Problem in Transport Theory, *PR* 72, No 7 (1947)
- [58] M. J. Lindenfeld ; B. Shizgal, The Milne problem : A study of the mass dependence, *PRA* 27, No 3 (1983)

- [59] J. Barrett, L. Demeio and B. Shizgal, Coulomb Milne problem, PRA 45, No 6 (1992)
- [60] T. Valet ; A. Fert, Theory of perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers, PRB 48, No 10, 7099-7113 (1993)
- [61] N. Strelkov et Al, Extension of the semiclassical theory of current-perpendicular-to-plane giant magnetoresistance including spin flip to any multilayered magnetic structures, J. Appl. Phys Vol 94, No 5 (2003)
- [62] E. I. Rashba, Diffusion theory of spin injection through resistive contacts, Eur. Phys. J. B 29, No 4, 513-527 (2002)
- [63] A. Vedyayev et Al, A unified theory of CIP and CPP giant magnetoresistance in magnetic sandwiches, Jour. of. Mag and Mag Mat 172 (1997)
- [64] A. Brataas, Non-collinear magnetoelectronics, Physics Reports 427 (2006) 157255
- [65] J. Thingnaa ; J. S. Wang, Geometrical effects on spin injection : 3D spin drift diffusion model, J. Appl. Phys 109, 124303 (2011)
- [66] W. H. Butler et Al, Solution to the Boltzmann equation for layered systems for current perpendicular to the planes, J. Appl. Phys Vol 87, No 9 (2000)
- [67] M. J. Ma et Al, Boltzmann transport study of bulk and interfacial spin depolarization effects in spin valves, J. Appl. Phys 103, 073917 (2008)
- [68] H. Imamura, Spin accumulation and magnetoresistance of a CPP-GMR system with a current confined path, Phys. Stat. Sol. (b) 244, No 12, 43944397 (2007)
- [69] K. Flensberg et Al, Diffusion equation and spin drag in spin-polarized transport, PRB 64, 245308 (2001)
- [70] T. Yamauchi ; K. Mizushima, Theoretical study of a hot-electron device with a base consisting of a magnetic multilayer, J. Appl. Phys Vol 91, No 12 (2002)
- [71] S. G. Tan et Al Layer thickness effect on the magnetoresistance of a current-perpendicular-to-plane spin valve, J. Appl. Phys 100, 063703 (2006)
- [72] V. Ya. Kravchenko ; E. I. Rashba, Spin injection into a ballistic semiconductor microstructure, PRB 67, 121310 (2003)
- [73] E. I. Rashba, Theory of electrical spin injection : Tunnel contacts as a solution of the conductivity mismatch problem, PRB Vol 62, No 24 (2000)
- [74] H. E. Camblong et Al, Magnetoresistance of multilayered structures for currents perpendicular to the plane of the layers, PRB 47, No 8, 4735-4741 (1993)
- [75] S. Zhang ; P. M. Levy, Interplay of the specular and diffuse scattering at interfaces of magnetic multilayers, PRB 57, No 9 (1998)
- [76] A. Shpiro ; P. M. Levy, Resistance across an interface, and that measured far from it, PRB Vol 63, 014419 (2000)
- [77] B. Laikhtman ; S. Luryi, Landauer formula for transmission across an interface, PRB Vol 49, No 24 (1994)
- [78] B. P. Vodopyanov ; L. R. Tagirov, Boundary resistance in magnetic multilayers, J. Phys. Condens. Mat 18, 15451552 (2006)

- [79] S. P. Chen ; C. R. Chang, Induced interfacial diffusive scatterings from different mean free paths between adjacent materials, *J. Appl. Phys* 99, 08R502 (2006)
- [80] R.J. Baxter et Al, Interface proximity effects in current-perpendicular-to-plane magnetoresistance, *PRB* 71, 024415 (2005)
- [81] P. C. V. Son et Al, Boundary resistance of the ferromagnetic nonferromagnetic metal interface, *PRL* 58, No 21 (1987)
- [82] K. M. Schep et Al Interface resistances of magnetic multilayers, *PRB* Vol 56, No 17 (1997)
- [83] J. Barnas ; A. Fert, Interfacial scattering in layered magnetic structure, *J. Mag and Mag. Mat* 140-144, 509-510 (1995)
- [84] J. Barnas ; A. Fert, Interface resistance for perpendicular transport in layered magnetic structures, *PRB* 49, No 18 (1994)
- [85] M. Wawrzyniak et Al, Influence of interface spin-flip scattering on spin accumulation and spin currents in magnetic multilayers with collinear magnetizations, *J. Appl. Phys* 99, 023905 (2006)
- [86] N. L. Chung et Al, Interfacial resistance and spin flip effects on the magnetoresistance of a current perpendicular to plane spin valve, *J. Appl. Phys* 103, 07F308 (2008)
- [87] V. F. Los ; A. V. Los, Theory of interlayer magnetic coupling in nanostructures with disordered interfaces, *PRB* 77, 024410 (2008)
- [88] V. F. Los, Self-consistent theory of scattering at disordered interfaces in layered nanostructures, *PRB* 72, 115441 (2005)
- [89] D. A. Stewart et Al, Interfacial scattering in magnetic multilayers and spin valves, *PRB* 68, 014433 (2003)
- [90] Y. Xu et Al, Spin dependence of interfacial reflection phase-shift at the Cu-Co interface, *PRB* 76, 184431 (2007)
- [91] S. Datta, Nanoscale device modeling : the Greens function method, *Superlattices and Microstructures*, *Superlattices and Microstructures* Vol 28, No 4 (2000)
- [92] K. P. McKenna et Al, Quantum transport simulation based on an equation of motion method : An application to current-perpendicular-to-the-plane giant magnetoresistance, *PRB* 72, 054418 (2005)
- [93] E. S. Noh et Al, A theoretical study of a spin polarized transport and giant magnetoresistance : The effect of the number of layers in a magnetic multilayer, *J. Appl. Phys* 103, 083903 (2008)
- [94] E. Yu. Tsymbal ; D. G. Pettifor, Quantum-well resistivity for perpendicular transport in magnetic layered systems, *PRB* 61, No 1 (2000)
- [95] H. U. Baranger ; A. D. Stone, Electrical linear response theory in an arbitrary magnetic field : a new Fermi-surface formation, *PRB* 40, No 12, 8169-8193 (1989)
- [96] K. M. Schep et Al, Ballistic transport and electronic structure, *PRB* 57, No 15, 8907-8926 (1998)
- [97] A. Vedyayev et Al, Angular variation of giant magnetoresistance for current perpendicular to the plane of the layers, *PRB* 55, No 6, 3728-3733 (1997)

- 
- [98] A. Brataas; G. E. W. Bauer, Semiclassical theory of perpendicular transport and giant magnetoresistance in disordered metallic multilayers, PRB 49, No 20, 14684-14699 (1994)
- [99] K. Kazymyrenko; X. Waintal, Knitting algorithm for calculating Green functions in quantum systems, PRB 77, 115119 (2008)
- [100] S. Zhang et Al, Conductivity and magnetoresistance of magnetic multilayered structures, PRB 45, No 15, 8689-8702 (1992)
- [101] E. Y. Tsymbal; D. G. Pettifor, Quantum-well resistivity for perpendicular transport in magnetic layered systems, PRB 61, No 1, 506-510 (2000)
- [102] K. I. Imura et Al, Conductance of one-dimensional quantum wires, PRB 66, 035313 (2002)
- [103] K.-V. Pham et Al, Tomonaga-Luttinger liquid with reservoirs in a multi-terminal geometry, PRB 68, 205110 (2003)
- [104] A. Brataas et Al, Spin-transport in multi-terminal normal metal-ferromagnet systems with non-collinear magnetizations, Eur. Phys. J. B 22, 99-110 (2001)
- [105] A. Fert; H. Jaffrès, Conditions for efficient spin injection from a ferromagnetic metal into a semiconductor, PRB Vol 64, 184420 (2001)
- [106] H. Jaffres et Al, Spin transport in multiterminal devices : Large spin signals in devices with confined geometry, PRB 82, 140408 (2010)
- [107] S. Hershfield; H. L. Zhao, Charge and spin transport through a metallic ferromagnetic-paramagnetic-ferromagnetic junction, PRB 56, No 6 (1997)
- [108] X. Lou and Al, Electrical detection of spin transport in lateral ferromagnetsemiconductor devices, nature physics VOL 3 (2007)
- [109] S. W. Jung; H. W. Lee, Spin current induced charge current, PRB 71, 125341 (2005)
- [110] J. Bass; W. P. Pratt, Spin-diffusion lengths in metals and alloys, and spin flipping at metal/metal interfaces : an experimentalist's critical review, J. Phys. Condens. Mat 19, 183201 (2007)
- [111] W. C. Chiang et Al, Search for mean-free-path effects in current-perpendicular-to-plane magnetoresistance, PRB 69, 184405 (2004)
- [112] K. Eid et Al, Further evidence against mean-free-path effects in the CPP-MR, J. Mag and Mag. Mat 240 (2002) 171173
- [113] L. A. Michez et Al, Direct evidence for mean-free-path effects in the magnetoresistance of magnetic multilayers with the current perpendicular to the planes, PRB 70, 052402 (2004)
- [114] D. Bozec et Al, Mean Free Path Effects on the Current Perpendicular to the Plane Magnetoresistance of Magnetic Multilayers, PRL Vol 85, No 6 (2000)
- [115] K. eid et Al, Absence of mean free path effects in the current perpendicular to plane magnetoresistance of magnetic multilayers, PRB 65, 054424 (2002)
- [116] A. Fert, Nobel Lecture : origin, development and the future of spintronics, Rev. Mod. Phys, Vol 80 (2008)
- [117] M. A. M. Gijs et G. E. W. Bauer, Perpendicular giant magnetoresistance of magnetic multilayers, Adv. Phys 46 :3-4, 285-445 (1997)



- [118] L. A. Michez ; B. J. Hickey, Dependence of the magnetoresistance of magnetic multilayers on the number of magnetic layers, PRB 77, 012408 (2008)
- [119] D. Tripathy ; A. O. Adeyeye, Effect of spacer layer thickness on the magnetic and magnetotransport properties of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/Cu/Ni<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub> spin valve structures, PRB 75, 012403 (2007)
- [120] L. A. Michez et Al, Magnetoresistance of magnetic multilayers containing three types of magnetic layers, PRB 67, 092402 (2003)
- [121] A. Sharma et Al, Conduction electron scattering and spin-flipping at sputtered Al/Cu Interfaces, J. Appl. Phys 109, 053903 (2011)
- [122] A. Sharma et Al, Current-perpendicular-to-plane magnetoresistance of ferromagnetic interfaces ( $F = Py$ , Co, Fe, and  $Co_{91}Fe_9$ ) and structural studies of Co/Al and Py/Al, PRB 77, 224438 (2008)
- [123] N. Theodoropoulou et Al, Ballistic versus diffusive transport in current-induced magnetization switching, PRB 76, 220408(R) (2007)
- [124] J. S. Noh et Al, Interfacial spin polarization and resistance in lateral spin-valves incorporating Bi and BiPb thin films, J. Appl Phys 108, 083902 (2010)
- [125] H. Y. T. Nguyen et Al, Conduction electron spinflipping at sputtered Co<sub>90</sub>Fe<sub>10</sub>/Cu interfaces, J. Appl. Phys 109, 07C903 (2011)
- [126] C. Ahn et Al, Current-perpendicular-to-plane spin transport properties of CoFe alloys : Spin diffusion length and scattering asymmetry, J. Appl Phys 108, 023908 (2010)
- [127] C. Ahn et Al, Magnetotransport properties of CoFeB and Co/Ru interfaces in the current-perpendicular-to-plane geometry, Appl. Phys. Lett 92, 102509 (2008)
- [128] Y. K. Takahashi et Al, Large magnetoresistance in current-perpendicular-to-plane pseudospin valve using a Co<sub>2</sub>FeGe<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub> Heusler alloy, Appl. Phys. Lett 98, 152501 (2011)
- [129] S. K. Olson et Al, Comparison of measured and calculated specific resistances of Pd/Pt interfaces, Appl. Phys. Lett 87, 252508 (2005)
- [130] H. Y. T. Nguyen et Al, Conduction electron scattering and spin flipping at sputtered Co/Ni interfaces, PRB 82, 220401(R) (2010)
- [131] X. T. Tang et Al, Layer thickness dependence of CPP giant magnetoresistance in individual CoNi/Cu multilayer nanowires grown by electrodeposition, PRB 75, 134404 (2007)
- [132] K. Eid et Al, Current perpendicular to plane magnetoresistance properties of Ru and Co/Ru interfaces, J. Appl. Phys 91, No 10 (2002)
- [133] J. W. Jung et Al, Spin scattering asymmetric coefficients and enhanced specific interfacial resistance of fully epitaxial current-perpendicular-to-plane giant magnetoresistance spin valves using alternate monatomic layered  $[Fe/Co]_n$  and a Ag spacer layer, J. Appl. Phys 109, 07C510 (2011)
- [134] S.-F. Lee et Al, Current-perpendicular and current-parallel giant magnetoresistances in Co/Ag multilayers, PRB 52, No 21 (1995)
- [135] L. L. Henry et Al, Perpendicular interface resistances of sputtered Ag/Cu, Ag/Au, and Au/Cu multilayers, PRB 51, No 17 (1996)

- [136] T. Kimura ; Y. Otani, Large Spin Accumulation in a Permalloy-Silver Lateral Spin Valve, PRL 99, 196604 (2007)
- [137] O. Bengone et Al, Origin of the negative giant magnetoresistance effect in  $Co_{1-x}Cr_x/Cu/Co(111)$  trilayers, PRB 69, 092406 (2004)
- [138] R. Acharyya et Al, A study of spinflipping in sputtered IrMn using Py-based exchange-biased spin-valves, J. Appl. Phys 109, 07C503 (2011)
- [139] R. Acharyya et Al, Specific resistance of Pd/Ir interfaces, Appl. Phys. Lett 94, 022112 (2009)
- [140] A. Sharma et Al, Specific resistance and scattering asymmetry of Py/Pd, Fe/V, Fe/Nb and Co/Pt interfaces, J. Appl. Phys 102, 113916 (2007)
- [141] S. Y. Hsu et Al, Spin-diffusion lengths of  $Cu_{1-x}Ni_x$  using current perpendicular to plane magnetoresistance measurements of magnetic multilayers, PRB 54, No 13, (1996)
- [142] Q. Yang et Al, Spin Flip Diffusion Length and Giant Magnetoresistance at Low Temperatures, PRL 72, No 20 (1994)
- [143] L. Wang et Al, Efficient spin injection into nonmagnetic metals through low-resistance MgO, J. Appl. Phys 109, 07C506 (2011)
- [144] J. Wiggins et Al, Thickness dependence of giant magnetoresistance of AgNiFe heterogeneous alloys films, J. Appl. Phys. 79, No 8 (1996)
- [145] B. Dieny et Al, Effect of scattering at lateral edges on the current perpendicular to plane giant magnetoresistance of submicronics pillars, J. App. Phys 89, No 11, 7302-7304 (2001)
- [146] Y. Tokura ; S. Tarucha, Roughness scattering in a finite-length wire, Physical Review B 55, No 23, 15740-15747 (1997)

### Transport CIP

- [147] M. Cormier et Al, Effect of electrical current pulses on domain walls in  $Pt/Co/Pt$  nanotracks with out-of-plane anisotropy : Spin transfer torque versus Joule heating, PRB 81, 024407 (2010)
- [148] E. H. Sondheimer, The mean free path of electron in metals, Adv in Phys Vol 50, No 6, 499-537 (2001)
- [149] B. L. Johnson ; R. E. Camley, Theory of giant magnetoresistance effects in Fe/Cr multilayers : spin-dependent scattering from impurities, PRB 44, No 18 (1991)
- [150] M. J. Ma et Al, Boltzmann transport study of bulk and interfacial spin depolarization effects in spin valves, J. Appl. Phys 103, 073917 (2008)
- [151] R. E. Camley ; J. Barnas, Theory of giant magnetoresistance effects in magnetic layered structures with antiferromagnetic coupling, PRL 63, No 6 (1989)
- [152] J. Barnas et Al, Novel magnetoresistance effect in layered magnetic structures : theory and experiment, PRB 42, No 13 (1990)
- [153] C. H. Marrows et Al, Finite size scaling effects in giant magnetoresistance multilayers, J. Phys. Condens. Matter 18 (2006) 243-252
- [154] K. Majumbar et Al, Calculation of giant magnetoresistance in laterally confined multilayers in the current in plane geometry, PRB 57, No 5 (1998)

- [155] R. Q. Hood ; L. M. Falicov, Boltzmann equation approach to the negative magnetoresistance of ferromagnetic normal metal multilayers, PRB 46, No 13 (1992)
- [156] L. Wang et Al, Interface or bulk scattering in the semiclassical theory for spin valves, PRB 69, 214403 (2004)
- [157] P. Rennert ; A. Brzezinski, Solution of the Boltzmann equation for multilayer systems, PRB 52, No 3 (1995)
- [158] J. Chen ; S. Hershfield, Effect of spin flip scattering on current in plane giant magnetoresistance, PRB 57, No 2 (1998)
- [159] R. Q. Hood et Al, Effects of interfacial roughness on the magnetoresistance of magnetic metallic multilayers, PRB 49, No 1 (1994)
- [160] R. Dimmich ; F. Warkusz, A simple model of the electrical field effect in thin metallic films, Thin Solid Film, 79, 173-184 (1981)
- [161] X. G. Zhang ; W. H. Butler, Conductivity of metallic film and multilayers, PRB 51, No 15 (1995)
- [162] A. Vedyayev et Al, Quantum effects in giant magnetoresistance due to interfaces in magnetic sandwiches, J. Mag and Mag. Mat 184, 145-154 (1998)
- [163] A. Vedyayev et Al, Quantum effects in the giant magnetoresistance of magnetic multilayered structures, J. Phys. Condens. Matter 5 (1993) 8289-8304
- [164] H. E. Camblong, Linear transport theory of magnetoconductance in metallic multilayers : A real-space approach, PRB 51, No 3 (1995)
- [165] J. M. Teixeira et Al, Quantum effects in atomically perfect specular spin valve structures, J. Phys Condens. Matter 20 (2008) 365205
- [166] N. Trivedi ; N. W. Ashcroft, quantum size effects in transport properties of metallic films, PRB 38, No 17 (1988)
- [167] G. Fisher ; H. Hoffman, oscillations of the electrical conductivity with thickness in very thin platinum films, Solid state Communications, Vol 35, 793-796 (1980)
- [168] H. Hoffmann ; G. Fischer, Electrical conductivity in thin and very thin platinum films, Thin Solid Films 36, 25-28 (1976)
- [169] V. B. Sandomirskii, quantum size effect in a semimetal film, Soviet Physics JETP Vol 25, No 1 (1967)
- [170] G. Fishman ; D. Calecki, Surface-induced resistivity of ultrathin metallic films : a limit law, PRL 62, No 11 (1989)
- [171] A. Vedyayev et Al, Angular Dependence of Giant Magnetoresistance in Magnetic Multilayered Structures, Europhys. Lett 25 (6), 465-470 (1994)
- [172] A. Vedyayev et Al, Quantum Theory of Giant Magnetoresistance of Spin-Valve Sandwiches, Europhys. Lett 19 (4), 329-335 (1992)
- [173] R. C Munoz et Al, Surface-induced resistivity of gold films on mica : comparison between the classical and the quantum theory, J. Phys. Condens. Matter 11 (1999) L299L307
- [174] H. E. Camblong ; P. M. Levy, Magnetic multilayers : Quasiclassical transport via the Kubo formula, J. Appl. Phys 73 (10) (1993)

- [175] H. E. Camblong ; P. M. Levy, Novel results for quasiclassical linear transport in metallic multilayers, PRL 69, No 19 (1992)
- [176] L. Sheng et Al, Transport theory in metallic films : crossover from the classical to the quantum regime, PRB 51, No 11 (1995)
- [177] G. Bergmann, Conductance of a Perfect Thin Film with Diffuse Surface Scattering, PRL 94, 106801 (2005)

### Transport de la lumière

- [178] J. Reichman, Determination of Absorption and Scattering Coefficients for Nonhomogeneous Media. 1 : Theory, Appl. Opt Vol. 12, No 8 (1973)
- [179] R. Elaloufi et Al, Diffusive-to-ballistic transition in dynamic light transmission through thin scattering slabs : a radiative transfer approach, J. Opt. Soc. Am. A Vol. 21, No 8 (2004)
- [180] W. E. Vargas, Diffuse radiation intensity propagating through a particulate slab, J. Opt. Soc. Am. A Vol 16, No 6 (1999)
- [181] Y. Kuga, Third- and fourth-order iterative solutions for the vector radiative transfer equation, J. Opt. Soc. Am. A Vol 8, No 10 (1991)
- [182] M. Elias ; G. Elias, New and fast calculation for incoherent multiple scattering, J. Opt. Soc. Am. A Vol 19, No 5 (2002)
- [183] J. I. Jiménez-Aquino ; J. R. varela, Two stream approximation to radiative transfer equation : An alternative method of solution, Revista Mexicana de Física 51 (1), 82-86 (2005)
- [184] N. J. McCormick, Analytic inverse radiative transfer equations for atmospheric and hydrologic optics, J. Opt. Soc. Am. A Vol. 21, No 6 (2004)
- [185] Q. Liu ; E. Ruprecht, Radiative transfer model : matrix operator method, Applied Optics Vol 35, No 21 (1996)
- [186] M. Elias ; G. Elias, Radiative transfer in inhomogeneous stratified scattering media with use of the auxiliary function method, J. Opt. Soc. Am. A Vol 21, No 4 (2004)
- [187] M. Elias et Al, Influence of interface roughness on surface and bulk scattering, J. Opt. Soc. Am. A Vol 27, No 6 (2010)
- [188] B. Maheu et Al, Four-flux models to solve the scattering transfer equation in terms of Lorenz-Mie parameters, Appl. Opt Vol 23, No 19 (1984)
- [189] I. N. Polonsky ; M. A. Box, General perturbation technique for the calculation of radiative effects in scattering and absorbing media, J. Opt. Soc. Am. A Vol 19, No 11 (2002)
- [190] J. X. Zhu et Al, Internal reflection of diffusive of light in random media, PRA Vol 44, No 6 (1991)
- [191] A. A. Kokhanovsky, Reflection of light from semi-infinite turbid media, J. Opt. Soc. Am. A Vol 15, No 11 (1998)
- [192] R. Elaloufi et Al, Time-dependent transport through scattering media : from radiative transfer to diffusion, J. Opt. A : Pure Appl. Opt. 4, S103S108 (2002)
- [193] G. W. Faris, Diffusion equation boundary conditions for the interface between turbid media, J. Opt. Soc. Am. A Vol 19, No 3 (2002)

- [194] M. Keijzer et Al, Optical diffusion in layered media, *Appl. Opt* Vol 27, No 9 (1988)
- [195] M. L. Shendeleva, Influence of boundary conditions on photon diffusion through an interface between two turbid media with different refractive indices, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 27, No 7 (2010)
- [196] J. Ripoll et Al, Boundary conditions for light propagation in diffusive media with nonscattering regions, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 17, No 9 (2000)
- [197] V. A. Markel ; J. C. Schotland, Inverse problem in optical diffusion tomography. II Role of boundary conditions, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 19, No 3 (2002)
- [198] A. Kienle, Light diffusion through a turbid parallelepiped, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 22, No 9 (2005)
- [199] , R. Aronson, Boundary conditions for diffusion of light, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 12, No 11 (1995)
- [200] R. C. Haskell et Al, Boundary conditions for the diffusion equation in radiative transfer, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 11, No 10 (1994)
- [201] J. M. Tualle et Al, Real-space Green's function calculation for the solution of the diffusion equation in stratified turbid media, *J. Opt. Soc. Am. A* Vol 17, No 11 (2000)
- [202] R. Carminati, Introduction aux transferts radiatifs, [<http://www.institut-langevin.espci.fr/Documents-telechargeables/>] (2005)
- [203] R. Carminati , Ondes en milieux complexes, [<http://www.institut-langevin.espci.fr/Documents-telechargeables/>] (2011-2012)
- [204] Romain Pierrat, Propagation et émission du rayonnement en milieu diffusant. Application à l'imagerie des milieux complexes [<http://www.institut-langevin.espci.fr/Documents-telechargeables/>]. Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) du CNRS et de l'ECP. 2007
- [205] Rachid Elaloufi, Propagation du rayonnement en milieu diffusant. Etude de la transition entre régime balistique et régime diffusif et des fluctuations temporelles d'intensité. [<http://www.institut-langevin.espci.fr/Documents-telechargeables/>]. Thèse de Doctorat. Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) du CNRS et de l'ECP. 2003
- [206] A. Yaroshevsky et Al, The transition from the ballistic to the diffusive regime in a turbid medium, *Opt. Lett*, Vol 36, No 8 (2011)
- [207] X. Zhang ; Z. Q. Zhang, Wave transport through thin slabs of random media with internal reflection : Ballistic to diffusive transition, *PRE* 66, 016612 (2002)

### Transport thermique

- [208] M. Xu ; H. Hu, A ballistic-diffusive heat conduction model extracted from Boltzmann transport equation, *Proc. R. Soc. A* (2011)
- [209] G. Lebon et Al, from ballistic to diffusive regimes in heat transport at nano-scales, *C. R. Mecanique* 339, 324-328 (2011)

- 
- [210] S. V. J. Narumanchi et Al, Boltzmann transport equation-based thermal modeling approaches for hotspots in microelectronics, *Heat Mass Transfer* (2006) 42, 478491
- [211] J. Zoua ; A. Balandin, Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire, *J. Appl. Phys* Vol 89, No 5 (2001)
- [212] E. S. Landry ; A. J. H. McGaughey, Effect of film thickness on the thermal resistance of confined semiconductor thin films, *J. Appl. Phys* 107, 013521 (2010)
- [213] L. Cheng et Al, From Boltzmann transport equation to single-phase-lagging heat conduction, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 51 (2008) 60186023
- [214] M. Grmela et Al, Ballistic-diffusive heat conduction at nanoscale : Generic approach, *PLA* 339 (2005) 237245
- [215] K. G. Whitney, Momentum and heat conduction in highly ionizable plasmas, *Physics of Plasmas* Vol 6, No 3 (1999)
- [216] S. S. Ghai et Al, A novel heat transfer model and its application to information storage systems, *J. Appl. Phys* 97, 10P703 (2004)
- [217] F. X. Alvarez ; D. Jou, Memory and nonlocal effects in heat transport : From diffusive to ballistic regimes, *Appl. Phys. Lett* 90, 083109 (2007)
- [218] D. G. Cahilla et Al, Nanoscale thermal transport, *J. Appl. Phys* Vol 93, No 2 (2003)
- [219] R. A. Guyer ; J. A. Krumhansl, Solution of the linearized phonon Boltzmann equation, *PR* Vol 148, No 2 (1966)
- [220] R. A. Guyer ; J. A. Krumhansl, Thermal Conductivity, Second sound and phonon hydrodynamic phenomena in nonmetallic crystals, *PR* Vol 148, No 2 (1966)
- [221] R. Prashera, Generalized equation of phonon radiative transport, *Appl. Phys. Lett* Vol 83, No 1 (2003)
- [222] D. Joua et Al, A phenomenological scaling approach, *Applied Mathematics Letters* 18 (2005) 963967
- [223] X. Lu, Approximate analytical models for estimation of the size-dependent thermal conductivity of nanoporous Si wires in the longitudinal direction, *J. Appl. Phys* 109, 044310 (2011)
- [224] X. Lu et Al, Size effect on the thermal conductivity of nanowires, *J. Appl. Phys* Vol 91, No 3 (2002)
- [225] G. Chena ; M. Neagu, Thermal conductivity and heat transfer in superlattices, *Appl. Phys. Lett.* 71, No 19 (1997)
- [226] R. Venkatesh et Al, Thermal resistance of metal nanowire junctions in the ballistic regime, *PRB* 83, 115425 (2011)
- [227] J. Ordonez-Miranda et Al, A constitutive equation for nano-to-macro-scale heat conduction based on the Boltzmann transport equation, *J. Appl. Phys* 109, 084319 (2011)
- [228] F. X. Alvarez ; D. Jou, Size and frequency dependence of effective thermal conductivity in nanosystems, *J. Appl. Phys* 103, 094321 (2008)

- [229] F. X. Alvarez et Al, Phonon hydrodynamics and phonon-boundary scattering in nanosystems, *J. Appl. Phys* 105, 014317 (2009)
- [230] G. Chen, Ballistic-Diffusive Heat-Conduction Equations, *PRL* 86, No 11 (2001)
- [231] A. A. Joshi ; A. Majumdar, Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin films, *J. Appl. Phys* 74 (1) (1993)
- [232] A. Majumdar, Microscale heat conduction in dielectric thin films, *Journal of heat transfer*, Vol 115/7 (1993)
- [233] J. Wang ; J. S. Wang, Carbon nanotube thermal transport : Ballistic to diffusive, *Appl. Phys. Lett* 88, 111909 (2006)
- [234] T. Y. Hsieh1 ; J. Y. Yang, Thermal conductivity modeling of circular-wire nanocomposites, *J. Appl. Phys* 108, 044306 (2010)
- [235] W. Liu ; M. Asheghia, Phonon boundary scattering in ultrathin single crystal silicon layers, *Appl. Phys. Lett* Vol 84, No 19 (2004)
- [236] X. Lüa, Analytical model for the boundary scattering phonon mean free path and thermal conductivity of nanowire heterostructures, *Appl. Phys. Lett* 96, 243109 (2010)
- [237] H. Zhao ; J. B. Freund, Phonon scattering at a rough interface between two fcc lattices, *J. Appl. Phys* 105, 013515 (2009)
- [238] E. T. Swartz ; R. O. Pohl, Thermal boundary resistance, *Reviews of Modern Physics* Vol 61, No 3 (1989)
- [239] S. Lepria et Al, Thermal conduction in classical low dimensional lattices, *Physics Reports* 377 (2003)
- [240] D. D. Joseph ; L. Preziosi, Heat Waves, *Reviews of Modern Physics* Vol 61, No 1 (1989)

### Ouvrages

- [241] J.P. Pérez, R. Carles et R. Fleckinger, *Electromagnétisme 4<sup>e</sup> éditions*, Dunod Paris (2002)
- [242] J. Coirier, *Mécanique des milieux continus*, Dunod Paris (2001)
- [243] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique des fluides (tome 6)*, Editions Mir Moscou (1971)
- [244] C. Kittel, *Physique de l'état solide 8<sup>e</sup> éditions*, Dunod Paris (2007)
- [245] E. Akkermans et G. Montambaux, *Physique mésoscopique des électrons et des photons, Savoir actuels*, EDP sciences/CNRS Éditions (2004)
- [246] Y.V. Nazarov and Y.M. Blanter, *Quantum transport introduction to nanoscience*, Cambridge University Press (2009)
- [247] H. Bruus and K. Lensberg, *Many body quantum theory in condensed matter physics An introduction*, Oxford Graduate Texts (2007)
- [248] S. Datta, H. Ahmad, M. Pepper and A. Broers, *Electronic Transport in Mesoscopic systems*, Cambridge University Press (1997)
- [249] N. Pottier, *physique statistique hors équilibre Processus irréversibles linéaires, Savoirs actuels*, EDP sciences/CNRS Éditions (2007)

- 
- [250] L. Landau et E. Lifchitz, Cinétique physique (tome 10), Editions Mir (1978)
- [251] J.L. Delcroix et A. Bers, Physique des plasmas Tome 1 et 2, Savoirs actuels, CNRS Éditions et InterEditions (1994)
- [252] J.M. Rax, Physique des plasmas, Sciences sup, Dunod Paris (2005)
- [253] A. Ishimaru, Wave propagation and scattering in random media Vol 1 et 2, Academic Press (1978)
- [254] J. Taine et J. P. Petit, Transferts thermiques - Introduction aux sciences des transferts, Editions Dunod (2003)
- [255] P. M. Morse et H. Feshback, Methods of theoretical Physics, Mc Graw Hill (1953)
- [256] A. Alastuey, M0. Magro et P. Pujol, Physique et outils mathématiques, Méthodes et exemples, Savoirs Actuels EDP Sciences CNRS Editions (2008)
- [257] J. Rammer, Quantum field theory of non equilibrium states, Cambridge University Press, 2007
- [258] L. S. Garcia-Colin et Al, Beyond the Navier-Stokes equations : Burnett hydrodynamics, Phys. Rep 465 (2008) 149-189
- [259] H. Grad, Asymptotic Theory of the Boltzmann Equation, The Physique of Fluids, Vol 6, No 2 (1963)