

THÈSE

en vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Centre de Recherche : Sciences et Technologies

Structure de Recherche : Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCScI)

Discipline : Sciences de la Matière Physique

Spécialité : Sciences des matériaux- Energies renouvelables

Présentée et Soutenue le : 03 / 05 / 2025

Par :

Kamal LAKAAL

***Etude des propriétés thermodynamiques, magnétiques
et magnéto-transports des semi-conducteurs de type
III-V, sous l'effet du couplage Rashba spin-orbite***

Devant le JURY :

Mimoun ZAZOUI	PES	Faculté des Sciences et techniques, Université Hassan II Mohammadia-Casa	Président
Mohammed BENAÏSSA	PES	Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat	Examineur/Rapporteur
Ahmed JELLAL	PES	Faculté des Sciences, Université Chouaib Doukkali, El Jadida	Examineur/Rapporteur
Mustapha BERAICH	PH	Faculté des Sciences et techniques, Université Cadi Ayyad, El Kelaa des Sraghna	Examineur/Rapporteur
Abdellatif BENABDELLAH	PES	Faculté des Sciences et techniques, Université Abdelmalek Essaâdi, Tanger	Examineur
Mohamed EL-YADRI	PH	Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Université Mohammed V, Rabat	Examineur
El Mustapha FEDDI	PES	Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Université Mohammed V, Rabat	Directeur de thèse

Année Universitaire : 2024 - 25

Dédicace

“Dédié à mes parents, mes sœurs et mes frères, mon grand-père et la famille qui m’a soutenu tout au long de ce parcours”

Kamal LAKAAL

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au Laboratoire de la Matière Condensée et des Sciences Interdisciplinaires (LaMCS*ScI*), au sein du groupe Optoélectronique des Semi-conducteurs et des Nanomatériaux de l'École Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Université Mohammed V de Rabat, sous la direction du Professeur **El Mustapha FEDDI**. Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance au Professeur Feddi pour son encadrement inestimable, son expertise scientifique et son soutien indéfectible tout au long de mes recherches. Ses qualités humaines exceptionnelles m'ont offert un environnement de travail idéal, propice à mon apprentissage et à mon épanouissement en tant que chercheur. Je lui adresse mes remerciements les plus sincères et ma gratitude la plus profonde.

Je tiens à remercier chaleureusement M. **Mimoun ZAZOUI**, PES à la Faculté des Sciences Techniques de Mohammadia-Casablanca, pour avoir accepté avec bienveillance le rôle de président du jury de soutenance. Malgré ses engagements et responsabilités, il m'a honoré en assumant cette fonction importante. Son expertise et son expérience en tant que professeur éminent, reconnu pour ses réalisations significatives, ont apporté une immense valeur au processus d'évaluation. Je suis profondément honoré de l'avoir comme président du jury.

Je tiens à remercier chaleureusement M. **Mohammed BENAÏSSA**, PES à la Faculté des Sciences de Rabat, pour son rôle de rapporteur de cette thèse. Ses précieuses observations, ses retours critiques et son expertise dans le domaine ont grandement

enrichi la qualité et la rigueur de ce travail.

Je suis reconnaissant envers M. **Ahmed JELLAL**, PES à la Faculté des Sciences, Université Chouaib Doukkali, El Jadida, pour son rôle de rapporteur de cette thèse. Ses observations pertinentes, ses retours critiques et son expertise ont également contribué de manière significative à améliorer la qualité et la rigueur de ce travail.

Je remercie également M. **Mustapha BERAICH**, PH à l'EST El Kelaa des Sraghna, Université Cadi Ayyad, pour son rôle de rapporteur de cette thèse. Ses observations pertinentes, ses retours critiques et son expertise ont également contribué de manière significative à améliorer la qualité et la rigueur de ce travail.

Je tiens à exprimer ma gratitude à M. **Abdellatif BEN ABDELLAH**, PES à la Faculté des Sciences et Techniques de Tanger, pour son évaluation rigoureuse de cette thèse. Son expertise, son examen approfondi et ses remarques précieuses ont contribué à renforcer la qualité et la crédibilité académique de ce travail. Je lui exprime mes sincères remerciements pour son temps, son engagement et ses contributions.

Je tiens également à exprimer ma gratitude à M. **Mohamed EL-YADRI**, PH à l'École Nationale Supérieure des Arts et Métiers de Rabat, qui a évalué et examiné rigoureusement cette thèse. Son expertise, son analyse approfondie et ses retours constructifs ont été essentiels pour renforcer la qualité académique et la crédibilité de ce travail. Je le remercie sincèrement pour le temps et le dévouement qu'il a consacrés à ce processus d'évaluation.

Enfin, je souhaite exprimer ma reconnaissance au Professeur **David LAROZE**, professeur à l'Université de Tarapacá (Chili). Leur implication et leurs contributions ont considérablement enrichi ma recherche. Les discussions collaboratives et les connaissances qu'ils ont partagées ont joué un rôle crucial dans les résultats obtenus. Je leur suis profondément reconnaissant pour leur soutien, leurs conseils et l'aide financière qui a permis cette collaboration fructueuse.

Abstract

This thesis is a research project on understanding the effects of Rashba spin-orbit coupling and electron-phonon/hole-phonon interaction on magnetic, thermodynamic, magnetocaloric and magneto-transport properties in confined systems. To determine all these properties, we first solved the Schrödinger equation to obtain the energy levels. Then we obtained all the thermodynamic functions using the canonical ensemble. The numerical calculation of our formalism is applied essentially in the first part to the *GaN* and *InAs* which are (III-V) compounds and to diluted magnetic semiconductors (*Ga, Mn*)*As* containing 3% Mn in the second part. Our results also show that all these properties depend strongly on the magnetic field, the confinement, the polaron effect and the Rashba spin-orbit interaction. The analysis of the magnetization and susceptibility confirms that the antiferromagnetic phase is associated with a ferromagnetic order in GaMnAs, which is in good agreement with the majority of previous work.

Keywords : Rashba spin-orbit interaction, Electron/hole-phonon coupling, Diluted magnetic semiconductors, Magnetization, Susceptibility.

Résumé

Cette thèse est une recherche sur la compréhension des effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon/trou-phonon sur les propriétés magnétiques, thermodynamiques, magnétocaloriques et de magnéto-transport dans les systèmes confinés. Afin de déterminer toutes ces propriétés, nous avons d'abord résolu l'équation de Schrödinger pour obtenir les niveaux d'énergie. Puis nous avons obtenu toutes les fonctions thermodynamiques en utilisant l'ensemble canonique. Le calcul numérique de notre formalisme est appliqué essentiellement aux composés du groupe $(III - V)$ GaN et $InAs$ dans la première partie et aux semi-conducteurs magnétiques dilués $(Ga, Mn)As$ contenant 3% Mn dans la deuxième partie. Nos résultats montrent également que toutes ces propriétés dépendent fortement du champ magnétique, du confinement, de l'effet polaronique et de l'interaction spin-orbite de Rashba. L'analyse de l'aimantation et de la susceptibilité confirme que la phase antiferromagnétique est associée à un ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en bon accord avec la majorité des travaux antérieurs.

Mots-clés : Interaction spin-orbite de Rashba, Couplage électron/trou-phonon, Semi-conducteurs magnétiques dilués, , Magnétisation, Susceptibilité.

Résumé détaillé

Les progrès récents et la maîtrise des phénomènes liés au spin et à son interaction avec le mouvement du système électronique ouvriront certainement la voie aux nouvelles applications dans le domaine de la spintronique. En se basant sur le caractère de spin de la charge (électron et trou), ce domaine émergent des dispositifs spintroniques utilise comme principe l'interaction du mouvement de spin avec les orbites des porteurs dans les nanomatériaux semi-conducteurs, connue sous le nom d'interaction spin-orbite. D'une manière générale, le concept d'interaction spin-orbite peut produire dans deux situations : La première correspond au interaction spin-orbite de Dresselhaus et la deuxième situation est connue sous le nom de l'interaction spin-orbite de Rashba et ne se produit que dans les structures de faible dimension.

Dans cette thèse, nous avons étudié l'effet de l'interaction spin-orbite de Rashba sur les propriétés physiques qui nous permettront d'exploiter pleinement le potentiel des semi-conducteurs (III-V) et du semi-conducteur magnétique dilué GaMnAs dans différentes applications notamment dans le domaine de la spintronique. Nous nous concentrons sur les propriétés magnétiques, thermodynamiques, magnétocaloriques et de magnéto-transport. Afin de réaliser cette analyse, nous avons résolu l'équation de Schrödinger dans le formalisme de la masse effective pour obtenir les niveaux d'énergie. Nous avons ensuite obtenu toutes les fonctions thermodynamiques en utilisant l'ensemble canonique.

Les résultats de nos recherches sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué, en présence du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sont présentés dans le troisième chapitre. nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour obtenir les niveaux d'énergie. puis nous avons obtenu toutes les fonctions thermodynamiques en utilisant l'ensemble canonique. Le calcul numérique de notre formalisme

est appliqué essentiellement aux composés du groupe (*III – V*) *GaN* et *InAs*. Notre calcul montre qu'à $B = 0T$, le système présente un comportement diamagnétique pour toutes températures, et avec une augmentation du champ magnétique, le système présente un comportement paramagnétique pour les deux cas associés "avec et sans effet polaronique".

Les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'une boîte quantique à trois électrons sont étudiés dans le chapitre 4. L'importance de cet étude est à évaluer en tenant compte de toutes les interactions entre électrons, y compris les interactions Coulombiennes entre électrons, les SOI et, surtout, les interactions entre électrons et phonons. nos résultats montrent que l'effet du couplage électron-phonon est beaucoup plus important pour des valeurs plus élevées du RSOI à des valeurs de champ magnétique faibles. Les résultats présentés dans ce chapitre sont importants pour les futures études expérimentales visant à développer de nouveaux dispositifs pour la spintronique.

Au dernier chapitre, nous avons étudié en détail les propriétés de magnéto-transport et de magnétocalorique du semi-conducteur dilué $(Ga, Mn)As$ contenant 3% Mn dans des systèmes confinés. L'analyse de l'aimantation et de la susceptibilité confirme que la phase antiferromagnétique est associée à un ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en bon accord avec la majorité des travaux antérieurs.

Mots-clés : Interaction spin-orbite de Rashba, Couplage électron/trou-phonon, Semi-conducteurs magnétiques dilués, , Magnétisation, Susceptibilité.

Detailed summary

Recently, the progress and the mastery of the phenomena related to the spin and its interaction with the electronic system motion will certainly open the way to new applications in the spintronic area. Nowadays, spin-based nanodevices for optoelectronic applications and quantum transport constitute a challenging area for many researchers. Based on the spin character instead of the charge carriers (electron and hole), this emerging field of spintronic devices uses as a principle the interaction of the spin motion with the carrier orbits in semiconductor nanomaterials known as spin-orbit interaction. Strictly speaking, the concept of spin-orbit interaction and the second situation is known as the Rashba spin-orbit interaction that takes place only in low dimensional structures.

In this thesis, we studied the effect of the Rashba spin-orbit interaction on the physical properties that will enable us to fully exploit the potential of (III-V) semiconductors and the dilute magnetic semiconductor GaMnAs in various applications, particularly in the field of spintronics. We are focusing on the magnetic, thermodynamic, magnetocaloric and magneto-transport properties. To carry out this analysis, we solved the Schrödinger equation in the effective mass formalism to obtain the energy levels. We then obtained all the thermodynamic functions using the canonical ensemble.

The results of our research on the magnetic and thermodynamic properties of a confined two-electron system subjected to an applied magnetic field, in the presence of Rashba spin-orbit coupling and electron-phonon interaction, are presented in the third chapter. The numerical calculation of our formalism is applied essentially to compounds in the group (III – V) *GaN* and *InAs*. Our calculation shows that at $B = 0T$, the system exhibits diamagnetic behaviour for all temperatures, and with an increase in the magnetic field, the system exhibits paramagnetic behaviour for the two associated cases ‘with and without polaronic effect’.

The magnetic and thermodynamic properties of a three-electron quantum dot box are studied in Chapter 4. The importance of this study has to be evaluated taking into account all the interactions between electrons, including the Coulomb interactions between electrons, the SOIs and, especially, the interactions between electrons and phonons. Our results show that the effect of the electron-phonon coupling is much greater for higher values of the RSOI at low magnetic field values. The results presented in this chapter are important for future experimental studies aimed at developing new devices for spintronics. In the final chapter, we studied in detail the magneto-transport and magnetocaloric properties of the $(Ga, Mn)As$ dilute semiconductor containing 3% Mn in confined systems. Analysis of the magnetization and susceptibility confirms that the antiferromagnetic phase is associated with a ferromagnetic order in GaMnAs, which is in good agreement with the majority of previous work.

Keywords : Rashba spin-orbit interaction, Electron/hole-phonon coupling, Diluted magnetic semiconductors, Magnetization, Susceptibility.

Table des figures

1.1	Comparaison entre différents matériaux. (a) Métal. (b) Isolant. (c) Semi-conducteur. (d) Éléments chimiques du tableau périodique qui constituent les matériaux semi-conducteurs.	7
1.2	Structure des bandes de (a) Si et (b) GaAs, avec E_g la bande interdite.	10
1.3	(a) Réseau diamant de Si et (b) Réseau zinc blende de GaAs.	10
1.4	Masse effective dans la bande de conduction (CB) et la bande de valence (VB).	11
1.5	(a)-(d) Illustration schématique de la densité d'états en fonction de l'énergie pour les systèmes tridimensionnels ($3D$) à zéro dimension ($0D$), respectivement. À température nulle, les états sont remplis jusqu'à l'énergie de Fermi.	13
1.6	Le semi-conducteur magnétique dilué peut être considéré comme un matériau intermédiaire entre le semi-conducteur pur et le semi-conducteur magnétique pur.	15
1.7	Diagramme de phase du $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ obtenu par épitaxie par jets moléculaires. D'après Ohno et al [65]	16
1.8	Incorporation de Mn dans un réseau semi-conducteur $III - V$ sur un site du groupe III	17
2.1	Présentation des propriétés et des phénomènes magnétiques dans les matériaux à l'état solide.	20
2.2	Matériaux diamagnétiques en fonction de champ magnétique h	21
2.3	Propriétés magnétiques des matériaux diamagnétiques selon : a) le champ et b) la température.	21
2.4	Comportement des matériaux paramagnétiques sous l'effet d'un champ magnétique.	22

2.5	Effet du champ magnétique et de la température sur les propriétés des matériaux paramagnétiques.	22
2.6	Aimantation des matériaux ferromagnétiques sous l'effet d'un champ magnétique externe ou non.	24
2.7	Susceptibilité magnétique d'un matériau ferromagnétique en fonction de la température.	25
2.8	Ordre antiferromagnétique refroidi en dessous de la température de Néel ($T < T_N$).	26
2.9	Comportement de la susceptibilité en fonction de la température dans le contexte des matériaux Antiferromagnétiques.	27
2.10	Représentation semi-classique d'un électron dans un atome. (a) Dans le référentiel d'un proton immobile, l'électron se déplace dans le champ électrostatique des protons. (b) Dans le référentiel de l'électron tournant autour du proton, le mouvement apparent du proton crée un champ magnétique qui affecte le spin de l'électron.	29
2.11	Représentation semi-classique d'un électron dans un groupe d'ions. a Point de vue des ions. b Point de vue de l'électron.	30
2.12	a) Réseau de diamants avec un centre d'inversion situé entre deux atomes du réseau. b) Dans le cristal de zinc blende, il n'y a pas de centre d'inversion, car un site sur deux dans le réseau contient un atome différent. Les semi-conducteurs typiques avec une configuration de zinc blende sont <i>GaAs</i> ou <i>InAs</i> . c) Relation énergie-impulsion en cas de symétrie d'inversion, lorsque les états sont dégénérés en spin. d) Relation énergie-impulsion en cas d'absence de symétrie d'inversion, lorsque la dégénérescence en spin est levée.	31
2.13	Texture de spin à la surface de Fermi. a Texture de spin due à Rashba, b Couplage Dresselhaus SO linéaire lorsqu'une contrainte est appliquée le long de [001]. Figure d'après [15]	33
2.14	(a) Relation de dispersion de Rashba et (b) Relation de dispersion de Dresselhaus avec la texture de spin représentée par les flèches en haut. .	34

3.1	Tracé de la susceptibilité de GaN en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10nm$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$) pour trois valeurs de température $T = 1K, T = 50K$ and $T = 100K$. Les lignes continues et les lignes en pointillé représentent respectivement le cas avec et sans RSOI ($\alpha_R \neq 0$ et $\alpha_R = 0$).	50
3.2	Tracé de la magnétisation de GaN en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10nm$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$) pour trois valeurs de température $T = 1K, T = 50K$ and $T = 100K$. Les lignes continues et les lignes en pointillé représentent respectivement le cas avec et sans RSOI ($\alpha_R \neq 0$ et $\alpha_R = 0$).	51
3.3	susceptibilité de GaN et $InAs$ QD en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10nm$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$).	53
3.4	Energie interne pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2meV$ and $\hbar\omega_0 = 16.9meV$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2meV$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (c) sans et avec RSOI à $B = 20T$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$	54
3.5	Capacité thermique pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2meV$ and $\hbar\omega_0 = 16.9meV$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2meV$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (c) sans et avec RSOI à $B = 20T$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$	55
3.6	Entropie pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2meV$ and $\hbar\omega_0 = 16.9meV$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2meV$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$).	56
3.7	Energie libre de Helmholtz pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2meV$ and $\hbar\omega_0 = 16.9meV$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2meV$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ ($eV.m$). (c) sans et avec RSOI à $B = 20T$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$	58

4.1	Tracé du potentiel effectif en fonction de ξ pour différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W = 0, 1, 5$, et 10).	67
4.2	Susceptibilité en fonction de ω_c/ω_0 pour quatre valeurs de RSOI, i.e., $\alpha_R = 0, 1, 2$, et $5.4meV \cdot nm$, avec $R'_W = 5$	69
4.3	Magnétisation for en fonction de ω_c/ω_0 pour trois valeurs de RSOI, i.e., $\alpha_R = 1, 2$, et $5.4meV \cdot nm$, avec $R'_W = 5$	69
4.4	Energie interne du <i>GaAs</i> QD en fonction de la température, (a) avec et sans phonons pour différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W, 1, 5$, et 10) avec $\alpha_R = 5.4meV \cdot nm$ et $B = 0.5T$. (b) avec et sans RSOI pour quatre valeurs du champ magnétique, i.e., $B = 0.5, 5, 10$, et $15T$, avec $R'_W = 5$	71
4.5	Capacité thermique du <i>GaAs</i> QD en fonction de la température, (a) avec et sans phonons pour différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W, 1, 5$, et 10) avec $\alpha_R = 5.4meV \cdot nm$ et $B = 0.5T$. (b) avec et sans RSOI pour quatre valeurs du champ magnétique, i.e., $B = 0.5, 5, 10$, et $15T$, avec $R'_W = 5$	72
4.6	Variation de l'entropie en fonction de la température de trois électrons en interaction (lignes continues) et d'électrons sans interaction (lignes pointillées) pour différentes valeurs de champ magnétique ($B = 5, 10$, et $15T$).	73
4.7	MCE en fonction de la température; (a) pour différentes valeurs du paramètre de Wigner, i.e., $R'_W, 1, 5$, et (b) avec et sans RSOI.	74
5.1	(a) Susceptibilité magnétique (χ) en fonction de la température pour différentes valeurs du champ magnétique. (b) χ en fonction de la température dans les deux cas de confinement $l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$. (c) susceptibilité inverse χ^{-1} en fonction de la température.	83
5.2	(a) La dépendance de l'aimantation au champ magnétique pour différentes valeurs de température. L'encadré montre la dépendance de l'aimantation à la température pour les deux cas $l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$. (b) montre la dépendance de l'aimantation à la température pour différentes valeurs du champ magnétique.	85

5.3	χ en fonction du champ magnétique pour différentes valeurs de température : (a) pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) pour $l_0 = 50 \text{ \AA}$	86
5.4	Capacité thermique en fonction de la température, (a) dans la gamme de champ magnétique de $B = 0,5$ à $B = 5 \text{ T}$ pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) pour les deux cas de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$).	87
5.5	Entropie en fonction de la température, (a) dans la gamme de champ magnétique de $B = 0,5$ à $B = 5 \text{ T}$ pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) pour les deux cas de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$).	88
5.6	Capacité thermique (a) et entropie (b) en fonction du champ magnétique, pour différentes valeurs de température ($\mathcal{T} = 0, \mathcal{T} = 0.5, \mathcal{T} = 5, \mathcal{T} = 10, \mathcal{T} = 25$ et $\mathcal{T} = 50 \text{ K}$), avec $l_0 = 25 \text{ \AA}$	89
5.7	Variation de ΔS_M (a) et $\Delta \mathcal{T}_{ad}$ (b) pour $\Delta B = 0.5, 1, 1.5$, et $\Delta B = 2 \text{ T}$, à $l_0 = 25 \text{ \AA}$	90
5.8	(a) Courants persistants I en fonction de B à température nulle pour les cas de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$), (b) I en fonction de B à température finie, (c) I en fonction de temperature pour $B = 0.5, B = 1.5$, et $B = 2.5 \text{ T}$, à $l_0 = 50 \text{ \AA}$ en tenant compte de l'effet des interactions trou-trou.	91

Liste des tableaux

1.1	Densité d'états $D(E)$, énergie de Fermi E_F et vecteur d'onde de Fermi k_F pour différentes dimensions, avec n_{3D} , n_{2D} et n_{1D} les concentrations de porteurs dans les différentes dimensions et g_s le facteur de dégénérescence du spin.	12
3.1	Paramètres des matériaux GaN et $InAs$ utilisés dans les calculs.	49
4.1	Les paramètres de $GaAs$ utilisés dans cette étude.	66
4.2	Fonction de partition pour différents champs magnétiques à $T_a = 100K$ et $T_a = 300K$	67
5.1	Paramètres de $(Ga,Mn)As$ utilisés dans les calculs.	83
5.2	Constante de Curie (C) et température paramagnétique de Weiss (θ).	84

Abréviations et nomenclatures

SOI	interaction spin-orbite
SOC	couplage spin-orbite
DSOI	interaction spin-orbite de Dresselhaus
RSOI	interaction spin-orbite de Rashba
QDs	boites quantiques
MBE	faisceaux moléculaires
DMS	semi-conducteurs magnétiques dilués
(LO) phonon	longitude-optique phonon

Table des matières

Dedication	i
Remerciements	ii
Abstract	iv
Résumé	v
Résumé détaillé	vi
Detailed summary	viii
Table des figures	x
Liste des tableaux	xv
Abbreviations and nomenclature	xvi
Introduction générale	1
1 Généralités sur les nanostructures semiconductrices	6
1.1 structures semi-conductrices de faible dimension	6
1.1.1 Aperçu général	6
1.1.2 Semi-conducteurs massifs	8
1.1.3 Structure de la bande	8
1.1.4 Masse effective	10
1.1.5 Densité d'Etat	12
1.2 Classification of nanostructures	13
1.2.1 Origin of natural and artificial nanomateriels	13
1.2.2 Dimensions of the nanostructured materials	14

1.3	Semi-conducteurs magnétiques dilués	14
1.3.1	Aperçu	14
1.3.2	Semi-conducteurs magnétiques dilués III-V	15
2	Magnétisme et interaction spin-orbite	18
2.1	Magnétisme dans les solides	19
2.1.1	Définitions et principes de base	19
2.1.2	Classification	19
2.2	Interaction spin-orbite	27
2.2.1	Origine de l'interaction spin-orbite	27
2.2.2	Effets Rashba et Dresselhaus	29
2.3	Techniques de résolution numérique de l'équation de Schrödinger	35
2.3.1	Model of determination of ground state	35
2.3.2	Approche Hartree-Fock	36
2.3.3	Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT	37
2.3.4	Approximation de la fonction enveloppe	38
2.4	Partie théorique des propriétés thermodynamiques, magnétiques et ma- gnétocaloriques	39
2.4.1	Propriétés thermodynamiques	39
2.4.2	Propriétés magnétiques	40
2.4.3	Propriétés magnétocaloriques	40
3	Propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué, en présence du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron- phonon.	42
3.1	Introduction	43
3.2	Base théorique	44
3.3	Résultats et discussions	48
3.3.1	propriétés magnétiques	49
3.3.2	propriétés thermodynamiques	53
3.4	Conclusion	58

4 Effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques d'un système à trois électrons.	60
4.1 Introduction	60
4.2 Base théorique	62
4.3 Résultats et discussions	66
4.3.1 propriétés magnétiques	68
4.3.2 propriétés thermodynamiques	70
4.3.3 effets magnétocaloriques	74
4.4 Conclusion	77
5 Propriétés magnéto-transports et magnétocaloriques du semi-conducteur magnétique dilué (Ga,Mn)As dans les systèmes confinés.	78
5.1 Introduction	78
5.2 Base théorique	80
5.3 Résultats et discussions	82
5.3.1 Propriétés magnétiques	83
5.3.2 Propriétés thermodynamiques	86
5.3.3 Effets magnétocaloriques	90
5.3.4 Propriétés magnéto-transports	91
5.4 Conclusion	92
Conclusion générale	93
6 Bibliographie	95
List of publications	105

Introduction générale

Récemment, les progrès et la maîtrise des phénomènes liés au spin et à son interaction avec le mouvement du système électronique ouvrent certainement la voie aux nouvelles applications dans le domaine de la spintronique. En se basant sur le caractère de spin de la charge (électron et trou), ce domaine émergent des dispositifs spintroniques utilise comme principe l'interaction du mouvement de spin avec les orbites des porteurs dans les nanomatériaux semi-conducteurs, connue sous le nom d'interaction spin-orbite (SOI)[1–4]. Ce concept est très impressionnant dans les systèmes confinés et ouvre la voie à la découverte d'autres propriétés extraordinaires, notamment dans le domaine de l'optoélectronique et des phénomènes de transport, telles que le Qbit pour la mémoire et l'informatique, les LED à spin, les batteries à spin, et bien d'autres dispositifs[5].

De manière générale, le concept d'interaction spin-orbite peut être considéré comme le résultat du comportement collectif des porteurs de charge et du spin dans les systèmes asymétriques. Ce couplage peut se produire dans deux situations : La première correspond au SOI de Dresselhaus (DSOI) qui apparaît dans le cas d'une asymétrie d'inversion globale qui correspond à une croissance cristalline non centrosymétrique comme dans les structures cristallines III-V et II-VI de Zinc Blende et de Wurtzite[6]. La deuxième situation est connue sous le nom de Rashba SOI (RSOI) et ne se produit que dans les structures de faible dimension. Elle est causée par l'asymétrie au cours du processus de croissance, en particulier dans l'hétérostructure, ou par une perturbation externe[7]. Ces deux effets provoquent des changements importants dans les propriétés optoélectroniques, thermodynamiques et magnétiques des nanomatériaux. Ils sont éga-

lement très sensibles aux changements de symétrie induits par le caractère polaire des matériaux (effets polaroniques) ou par des perturbations externes telles que le confinement, la température, les champs magnétiques et électriques. Les effets du RSOI et du DSOI sur la magnétisation et les propriétés thermodynamiques des systèmes confinés sont traités par plusieurs chercheurs. Ainsi, les propriétés thermodynamiques de nanofils soumis à un champ magnétique en tenant compte du SOI ont été traitées dans des nanofils utilisant un confinement parabolique [8].

Les systèmes avec un nombre contrôlé d'électrons dans les boîtes quantiques (QDs) attirent de plus en plus l'attention. Il a été démontré que le nombre d'électrons peut influencer le SOI et le RSOI, ce qui permet de réguler le spin dans les processus de magnéto-transport. Cette technique offre des possibilités intéressantes pour la production de dispositifs de spintronique. Les applications potentielles comprennent les systèmes de mémoire non volatile [9–13], l'informatique quantique [14], et d'autres dispositifs spintroniques [15].

En effet, pour comprendre le comportement collectif des électrons, il est très pratique de traiter le problème de deux électrons en interaction. Le système de deux électrons est considéré comme l'un des systèmes quantiques les plus attractifs. L'étude des propriétés de quelques électrons dans les boîtes quantiques (généralement appelées atomes artificiels) a fait l'objet de nombreuses recherches expérimentales [16–19] et théoriques [20–23]. De nombreuses études ont démontré que les interactions *électron-électron* jouent un rôle important dans les différentes propriétés physiques des systèmes confinés. Pour plus de détails, nous invitons le lecteur aux références suivantes [24–31]. Il convient également de mentionner que l'effet du SOI et de l'interaction électron-électron sur les propriétés magnétiques des matériaux a été analysé par Kumar et al [32].

En général, les semi-conducteurs présentent des caractéristiques polaires ou ioniques influençant les propriétés physiques des électrons. Cette polarisation intrinsèque induit une interaction électron-longitude-optique (LO) phonon appelée polaron. Bien que ces interactions soient plus faibles que l'interaction coulombienne électron-électron, elles sont similaires à celles des SOI. L'importance de ces effets sur les propriétés électroniques des QDs en présence d'un champ magnétique a été largement étudiée. Le formalisme de Fröhlich est un bon modèle pour étudier les effets polaroniques. Dans ce

formalisme, deux approches sont largement utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger avec des termes de phonon : les transformations de Landau–Pekar [33] ou de Lee–Low Pines [34]. Feddi et al. [35–37] ont étudié l'effet polaron sur des QDs sphériques dopés sous champs magnétiques et électriques. Les résultats de ces études indiquent que le spectre d'énergie et la polarisabilité dépendent fortement de l'effet polaronique dans les deux cas de confinement faible et fort. Récemment, nous avons étudié les effets des SOI sur les propriétés thermomagnétiques de deux et trois électrons dans des systèmes confinés en présence d'une interaction électron-phonon [38, 39]. Nous avons montré que les SOIs de Rashba (RSOIs) augmentent le champ magnétique de coupure B_c (la valeur de B à laquelle la nature magnétique du QD passe de diamagnétique à paramagnétique) avec une augmentation de la température. De plus, nous démontrons que l'effet polaron et les RSOIs réduisent l'énergie interne du système.

En réalité, comparé aux mouvements des porteurs de charge (électron et trou), le spin peut être commuté rapidement entre 2 états. Sur la base de ce concept, de nouveaux composants avec de nouvelles fonctionnalités sont développés : Capteur de magnétorésistance géant utilisé dans la tête de lecture des disques durs pour l'enregistrement à haute densité. Transistor polarisé en spin, émission de lumière polarisée en spin, nanopilier à jonction tunnel magnétique, torque de transfert de spin et effet Hall de spin [9–13].

Cependant, pour fabriquer ces nouveaux dispositifs pour l'électronique du futur, nous devons utiliser des matériaux capables de générer des effets spintroniques. De nombreux matériaux peuvent être cités : Ferromagnétiques semi-métalliques : CrO_2 , pérovskite : $(\text{La}, \text{Sr})\text{MnO}_3$; semi-conducteurs magnétiques : EuO , EuS , $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$ et CrAs , alliages Heusler : NiMnSb , matériaux anisotropes perpendiculaires $\text{CoFeB}/\text{MgO}/\text{CoFeB}$, matériaux antiferromagnétiques [40].

D'une manière générale, le dopage avec des impuretés magnétiques constitue un autre moyen d'obtenir des semi-conducteurs avec des propriétés spintroniques. Ainsi, pour les semi-conducteurs II-VI, où la valence du cation coïncide avec la valence des ions magnétiques (Mn , Cr), les interactions antiferromagnétiques sont très importantes avec une température de Curie très basse [41]. De même, les semi-conducteurs III-V dopés au Mn , appelés semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), tels que $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{N}$, $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$, $(\text{Zn}, \text{Mn})\text{Te}$ et (Ge, Mn) [42–44], ont attiré une attention considérable ces

dernières années en raison de leurs applications potentielles dans le domaine de la spintronique. Leur comportement magnétique dépend de plusieurs facteurs. En effet, le ferromagnétisme des DMS de III-V n'est pas bien compris et reste un sujet de débat et de controverse. Différents modèles ont été proposés pour expliquer leurs propriétés magnétiques. Les modèles les plus importants sont : Le modèle Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [45, 46] basé sur le couplage des moments magnétiques nucléaires ou des spins d'électrons localisés dans les couches d ou f par l'intermédiaire d'électrons de conduction. Le modèle de Zener [13, 47] qui utilise le fait que les trous de valence sont sur des orbitales p. Toutes ces approches montrent que le couplage entre les porteurs et les spins locaux revêt une importance fondamentale.

Dans le GaMnAs, les impuretés de Mn ont un électron non apparié qui possède un moment magnétique. À de faibles concentrations de Mn, ces moments magnétiques sont orientés de manière aléatoire, ce qui donne un moment magnétique nul. Néanmoins, à des concentrations de Mn plus élevées, les moments magnétiques des impuretés de Mn s'alignent les uns sur les autres, ce qui entraîne un comportement ferromagnétique. De nombreuses études ont montré qu'en présence d'une forte concentration de trous, il peut y avoir formation de moments magnétiques locaux par un processus appelé ferromagnétisme induit par les porteurs [48]. Cependant, à des concentrations de trous encore plus élevées, le système peut subir une transition vers un comportement antiferromagnétique [49]. Cette transition se produit parce que les trous peuvent servir de médiateur aux interactions entre les ions Mn qui favorisent l'alignement antiparallèle de leurs moments magnétiques. Plus précisément, les trous peuvent créer un couplage d'échange indirect entre les ions Mn, où un trou sur un ion Mn peut créer un moment magnétique local qui interagit de manière antiferromagnétique avec le moment magnétique d'un ion Mn adjacent. En fait, la relation entre la concentration de trous et le comportement antiferromagnétique dans le GaMnAs est complexe et dépend de divers facteurs, notamment de la concentration de Mn et de la température. Toutefois, on observe généralement qu'une augmentation de la concentration en trous peut entraîner une transition du comportement ferromagnétique au comportement antiferromagnétique des DMS GaMnAs.

Objectif et plan de thèse

Dans ce travail nous essayerons de répondre aux questions suivantes :

1) Quels sont les effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué.

2) Quel est l'effet du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques d'un système à trois électrons.

3) Quel sera le comportement des propriétés magnéto-transports et magnétocaloriques du semi-conducteur magnétique dilué (Ga,Mn)As dans les systèmes confinés.

Cette thèse est organisée de la façon suivante :

- * Chapitre 1, présente une généralité sur les nanostructures semiconductrices. Nous décrivons premièrement, les différents types de confinement de semi-conducteurs, y compris, le confinement 3D, 2D, 1D et 0D, aussi nous donnons une description détaillée des semi-conducteurs magnétiques dilués et leurs applications dans différents domaines.
- * Dans le chapitre 2, nous passons en revue, le magnétisme et l'interaction spin-orbite, nous étudions plus en détail l'origine de l'interaction spin-orbite et les effets de Rashba et Dresselhaus.
- * Au chapitre 3, nous traitons propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué, en présence du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon.
- * Dans le chapitre 4, nous étudions les effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques d'un système à trois électrons.
- * Le chapitre 5 est consacré à l'étude des propriétés magnéto-transports et magnétocaloriques du semi-conducteur magnétique dilué (Ga,Mn)As dans les systèmes confinés.

Généralités sur les nanostructures semiconductrices

1.1	structures semi-conductrices de faible dimension	6
1.1.1	Aperçu général	6
1.1.2	Semi-conducteurs massifs	8
1.1.3	Structure de la bande	8
1.1.4	Masse effective	10
1.1.5	Densité d'Etat	12
1.2	Classification of nanostructures	13
1.2.1	Origin of natural and artificial nanomateriels	13
1.2.2	Dimensions of the nanostructured materials	14
1.3	Semi-conducteurs magnétiques dilués	14
1.3.1	Aperçu	14
1.3.2	Semi-conducteurs magnétiques dilués III-V	15

1.1 structures semi-conductrices de faible dimension

1.1.1 Aperçu général

Les semi-conducteurs peuvent être classés comme des matériaux qui ont généralement une conductivité beaucoup plus faible que les métaux mais qui, contrairement

aux isolants, ont une conductance finie à des températures non nulles. La fig. 1.1(a)-(c) présente un schéma des états électroniques, i.e. des bandes, pour tous les types de matériaux. Dans les métaux, les états sont remplis jusqu'à l'énergie de Fermi E_F . Les états vides au-dessus de E_F permettent le transport électronique. Dans les isolants, la bande inférieure est entièrement occupée. Étant donné que dans une bande entièrement occupée, l'occupation des électrons ne peut pas être réorganisée, i.e. en appliquant un champ électrique, aucun transport n'est possible dans cette bande. La bande supérieure est séparée de la bande inférieure occupée par une grande bande interdite ($E_g > 4eV$). Aucune excitation thermique n'est donc possible. Dans un semi-conducteur, la bande interdite est plus petite ($0,15eV \leq E_g \leq 4eV$). Dans ce cas, les électrons peuvent être excités thermiquement dans la bande supérieure. Ces électrons excités peuvent participer au transport. En outre, les états inoccupés dans la bande inférieure, i.e. les trous, contribuent également au transport.

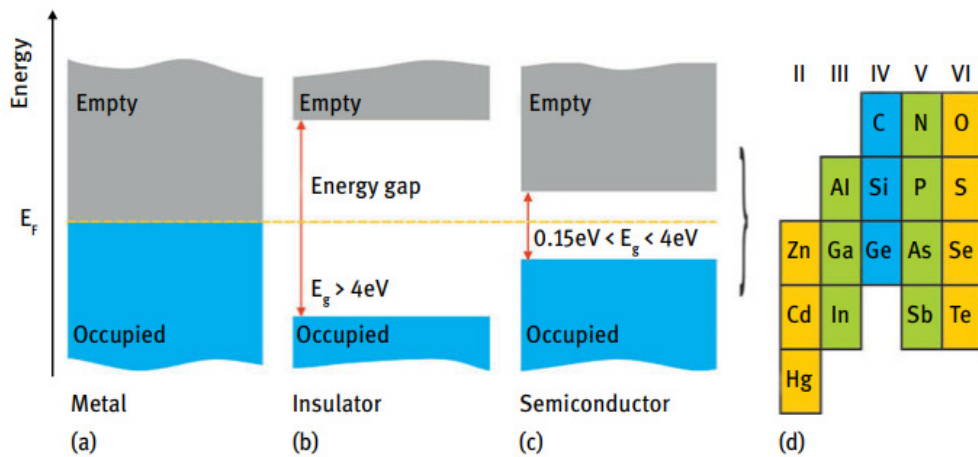


FIGURE 1.1 – Comparaison entre différents matériaux. (a) Métal. (b) Isolant. (c) Semi-conducteur. (d) Éléments chimiques du tableau périodique qui constituent les matériaux semi-conducteurs.

Quelle est la particularité des semi-conducteurs ? Premièrement, les semi-conducteurs intrinsèques, i.e. purs, ont généralement une faible conductivité, qui dépend fortement de la température. Deuxièmement, dans les cristaux semi-conducteurs contenant une petite quantité d'atomes étrangers, appelés dopants, la conductivité peut être augmentée de plusieurs ordres de grandeur.

En fonction de l'application, différents types de semi-conducteurs sont utilisés dans

l'électronique de spin (spintronique) :

- Le dopage des semi-conducteurs massifs est utilisé pour créer des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS).
- Les systèmes de couches de semi-conducteurs composés de couches de matériaux différents, i.e. les hétérostructures, sont utilisés dans les diodes électroluminescentes de spin.
- Les structures semi-conductrices de faible dimension, i.e. les structures à deux, une ou zéro dimension, ont des applications dans les transistors de spin et dans les dispositifs de calcul quantique basé sur le spin.

Dans ce chapitre, nous nous limiterons aux propriétés des semi-conducteurs pertinentes pour les applications spintroniques. Des informations plus générales peuvent être trouvées dans les manuels consacrés à la physique des semi-conducteurs [50] ou aux nanostructures semi-conductrices [51, 52].

1.1.2 Semi-conducteurs massifs

Comme l'illustre la fig. 1.1(d), les éléments chimiques des groupes *II* à *VI* sont à la base d'une grande variété de matériaux semi-conducteurs qui sont utilisés dans l'électronique à base de charge ainsi que dans la spintronique :

- Semi-conducteurs élémentaires, i.e. *Si* ou *Ge* : le Si est le matériau le plus utilisé pour l'électronique, en particulier pour les circuits intégrés.
- Semi-conducteurs composés : on distingue ici les semi-conducteurs *IV – IV* (groupe *IV* et groupe *IV*), par exemple *SiC* ; les semi-conducteurs *III – V*, par exemple *AlP*, *AlAs*, *GaAs*, *InP*, *InAs*, *InSb* ou *GaN*, et les semi-conducteurs *II – VI*, par exemple *ZnO*, *CdS*, *CdSe* ou *CdTe*. En particulier, les semi-conducteurs composés *III – V* sont intéressants pour l'optoélectronique et l'électronique à grande vitesse, en raison de leur bande interdite directe et de leur faible masse effective d'électrons.
- Alliages des semi-conducteurs mentionnés ci-dessus, par exemple Si_xGe_{1-x} , $Al_xGa_{1-x}As$, $Al_xGa_{1-x}Sb$, $In_xGa_{1-x}As$, ou $Al_xGa_{1-x}N$.

1.1.3 Structure de la bande

Dans le potentiel périodique d'un cristal, les niveaux atomiques discrets sont transformés en bandes d'énergie. La dispersion de l'énergie-impulsion $E_V(\vec{k})$ d'une structure

de bande décrit comment l'énergie E dépend du vecteur d'onde $\vec{k}$ dans une certaine bande $\mathcal{V}$. Dans la plupart des semi-conducteurs, i.e. le *Si*, les bandes supérieures proviennent d'orbitales atomiques de type s . Ces bandes ont pour origine le vecteur d'onde k dans une bande donnée. Ces bandes sont appelées bandes de conduction. Séparées par l'écart énergétique E_g , on trouve les bandes de valence. Ces bandes proviennent généralement d'orbitales atomiques de type p . Les structures de bandes typiques du *Si* et du *GaAs* sont illustrées à la fig. 1.2. La structure de bande est représentée pour différentes directions de symétrie dans la zone de Brillouin. Le point Γ correspond à $k = 0$. Les semi-conducteurs élémentaires *Si* et *Ge* ont une bande interdite indirecte, ce qui signifie que le maximum de la bande de valence au point Γ dans la zone de Brillouin ne correspond pas dans l'espace k au minimum de la bande de conduction. Le minimum de la bande de conduction se trouve à un vecteur k fini. À titre d'exemple, la structure de bande du semi-conducteur indirect *Si* est illustrée à la fig. 1.2(a). Par conséquent, aucune transition optique directe d'électrons de la bande de conduction vers la bande de valence n'est possible, car le photon ne peut pas fournir l'impulsion nécessaire. Les semi-conducteurs *Si* et *Ge* cristallisent dans le réseau diamant, représenté sur la fig. 1.3(a). La plupart des semi-conducteurs *III – V* ont une bande interdite directe. Dans ce cas, le maximum de la bande de valence est aligné dans l'espace k sur le minimum de la bande de conduction. Un exemple typique est la structure de bande du *GaAs* illustrée à la fig. 1.2(b). Dans ce cas, des transitions optiques directes sont possibles, ce qui explique leur utilisation courante en optoélectronique. La longueur d'onde des photons émis lors des transitions est déterminée par la bande interdite, E_g . Par exemple, en spintronique, les semi-conducteurs à bande interdite directe sont utilisés pour réaliser une diode électroluminescente de spin. Cependant, certains semi-conducteurs *III – V* ont une bande interdite indirecte, comme l'*AlAs*. La plupart des semi-conducteurs *III – V* cristallisent dans le réseau de zinc blende, comme le montre la fig. 1.3(b), par exemple *GaAs* ou *InP* ; cependant, certains se trouvent dans le réseau wurtzite, par exemple *GaN*.

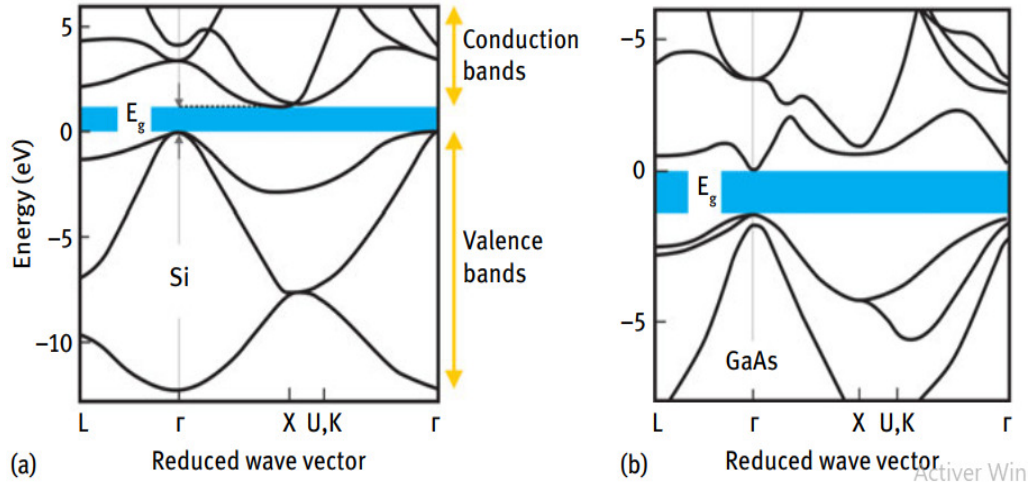


FIGURE 1.2 – Structure des bandes de (a) Si et (b) GaAs, avec E_g la bande interdite.

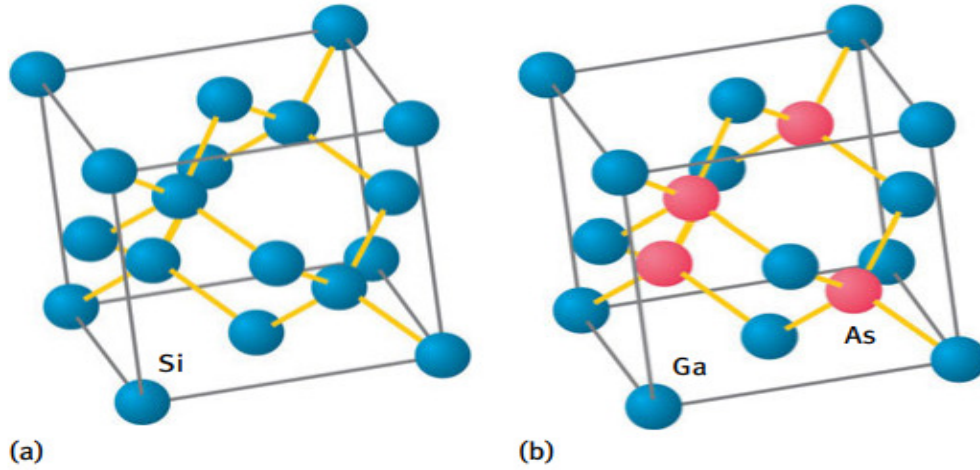


FIGURE 1.3 – (a) Réseau diamant de Si et (b) Réseau zinc blende de GaAs.

1.1.4 Masse effective

En raison du potentiel périodique dans un cristal, les porteurs dans un semi-conducteur ont une masse effective m^* qui diffère de la masse des électrons libres m_0 . m^* est exprimée comme suit :

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (1.1)$$

La masse effective est proportionnelle à la courbure inverse de la dispersion de la bande $E(k)$. Ainsi, m^* est une conséquence directe de la structure de la bande et du potentiel

périodique correspondant du réseau cristallin. Autrement dit, la masse effective d'une particule est la masse qu'elle porte dans un modèle semi-classique de transport dans un cristal. Selon les détails de la structure de bande, elle peut également dépendre de la direction de propagation. Dans de nombreux cas, il suffit de décrire la structure de bande par une approximation parabolique autour des points extrêmes, c-à-d le point Γ (cf. fig. 1.4). Dans ce cas, l'énergie cinétique peut s'écrire comme suit

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.2)$$

On obtient ici une masse effective constante m^* , qui est une bonne approximation proche des maxima ou minima des bandes de valence et de conduction, respectivement. Comme on peut le voir sur la fig. 1.4, la bande de valence est doublement dégénérée au point Γ .

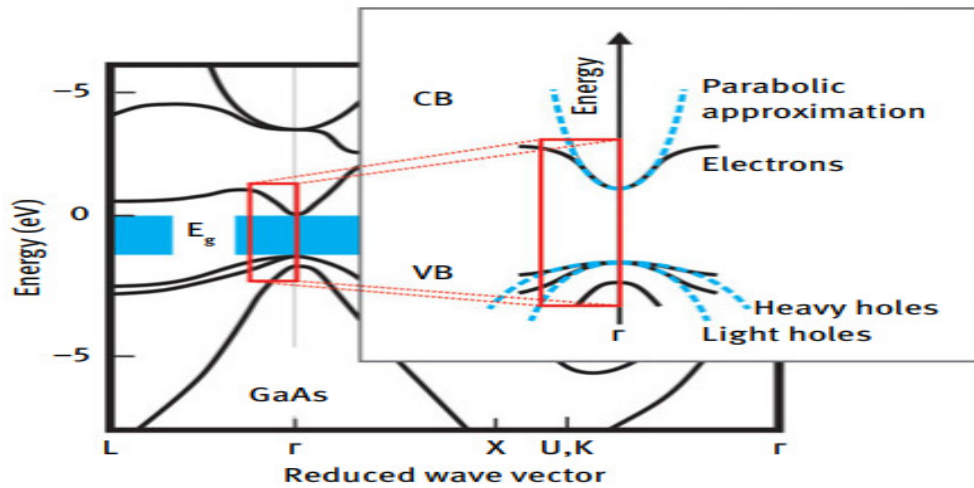


FIGURE 1.4 – Masse effective dans la bande de conduction (CB) et la bande de valence (VB).

En revanche, pour des vecteurs k finis, deux bandes de valence avec une dispersion énergie-impulsion différente apparaissent. Les dispersions paraboliques correspondantes ont des courbures différentes, ce qui se traduit par des masses effectives de trous différentes. Les trous dans la bande avec la plus petite courbure ont une masse effective plus importante (trous lourds), tandis que les trous dans l'autre bande ont une masse effective plus légère (trous légers). Dans la plupart des cas, la masse effective des électrons est inférieure à la masse effective des trous dans la bande de valence. En fin, il faut garder à l'esprit qu'à champ magnétique nul et en l'absence de couplage spin-orbite,

chaque état appartenant à un vecteur d'onde donné dans une bande est doublement dégénéré en raison des deux états de spin.

1.1.5 Densité d'Etat

La densité d'états $D(E)$ est une mesure du nombre d'états pour un intervalle d'énergie donné. Elle dépend essentiellement de la dimensionnalité du système.

TABLE 1.1 – Densité d'états $D(E)$, énergie de Fermi E_F et vecteur d'onde de Fermi k_F pour différentes dimensions, avec n_{3D} , n_{2D} et n_{1D} les concentrations de porteurs dans les différentes dimensions et g_s le facteur de dégénérescence du spin.

	3D	2D	1D
$D(E)$	$g_s \frac{1}{2\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^3} \sqrt{2m^* E}$	$g_s \frac{m^*}{2\pi\hbar^2}$	$\frac{g_s}{\pi} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}}$
E_F	$\frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{3\pi^2}{\sqrt{2}} \frac{1}{g_s} \right)^{2/3} n_{3D}^{2/3}$	$\frac{2\pi\hbar^2}{m^* g_s} n_{2D}$	$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2g_s^2 m^*} n_{1D}^2$
k_F	$\sqrt[3]{\frac{6\pi^2 n_{3D}}{g_s}}$	$\sqrt{\frac{4\pi n_{2D}}{g_s}}$	$\frac{\pi n_{1D}}{g_s}$

Pour un système unidimensionnel, la densité d'état dépend donc de $\frac{1}{\sqrt{E}}$, avec des singularités à $E = E_{ij}$, comme le montre la fig. 1.5(c). De la même manière, la densité d'état peut être calculée pour un système bidimensionnel et tridimensionnel. Comme on peut le déduire du tableau 1.1, pour une structure bidimensionnelle, la densité d'états est constante. Dans le cas où il existe plus d'un niveau E_j , $D(E)$ a une forme en escalier, comme le montre la fig. 1.5(b). Pour un système tridimensionnel, la densité d'états dépend de $\sqrt{E}$ (cf. fig. 1.5(a)). Seuls des niveaux discrets sont présents dans un système à zéro dimension, une structure dite en points, de sorte que la densité d'états peut être décrite par une séquence de fonctions δ , comme le montre la fig. 1.5(d).

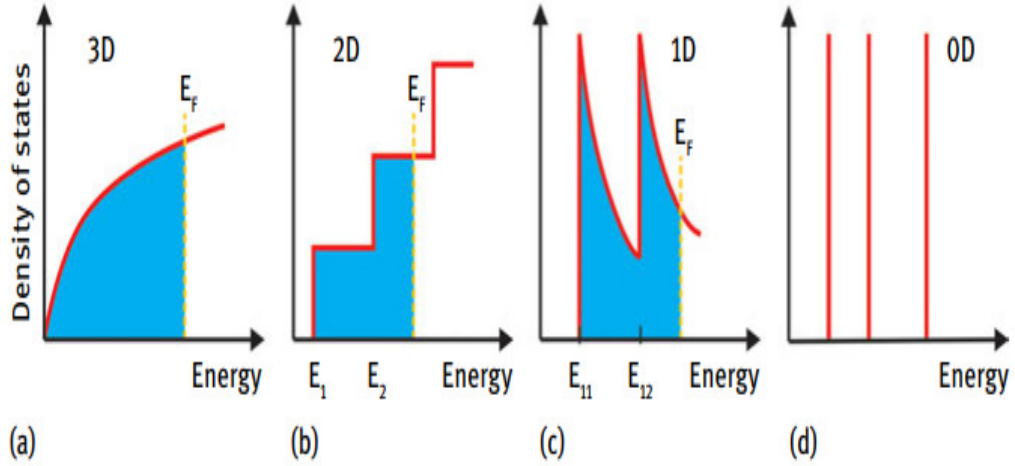


FIGURE 1.5 – (a)-(d) Illustration schématique de la densité d'états en fonction de l'énergie pour les systèmes tridimensionnels ($3D$) à zéro dimension ($0D$), respectivement. À température nulle, les états sont remplis jusqu'à l'énergie de Fermi.

1.2 Classification of nanostructures

Les matériaux nanostructurés sont construits à partir de matériaux massifs, mais leur taille est $< 100nm$. Outre leur taille, ils diffèrent également des matériaux massifs par leurs propriétés physiques et chimiques. Au cours des dernières décennies, les nanoparticules ont fait l'objet d'une grande attention, au dépens des microparticules. La réduction de la taille des nanomatériaux permet la prédominance des effets quantiques. Bien qu'il n'existe pas de règle générale pour classer les matériaux nanostructurés, ils peuvent être classés de manière générale dans les sous-sections suivantes.

1.2.1 Origin of natural and artificial nanomaterials

Les matériaux nanostructurés naturels, qui sont présents à l'intérieur des ressources naturelles ou obtenus à partir de celles-ci, sont les nanomatériaux naturels tels que les molécules de protéines, les virus, les anticorps et la gélatine, qui sont tous des exemples de nanomatériaux naturels. Les matériaux nanostructurés artificiels sont ceux qui n'existent pas dans la nature, mais qui sont synthétisés par des méthodes chimiques ou mécaniques bien établies, comme les nanocarbones (graphène, nanotubes de carbone), les oxydes métalliques et les nanoparticules semi-conductrices de chalcogénure,

etc.

1.2.2 Dimensions of the nanostructured materials

En fonction des dimensions, les matériaux nanostructurés sont principalement classés en matériaux à zéro, une, deux et trois dimensions dans la nature. Les matériaux nanostructurés de dimension zéro ($0D$) ont une taille de l'ordre du nm dans les trois dimensions [53, 54]. Dans le cas des matériaux nanostructurés unidimensionnels ($1D$), la taille dans une direction est supérieure à l'échelle nanométrique. Les nanorods, les nanofils, les nanotubes de carbone et les fibres de nanocristaux sont quelques exemples de nanostructures 1D [55, 56]. Dans les matériaux nanostructurés bidimensionnels ($2D$), la taille est supérieure à l'échelle du nm pour deux directions [57, 58]. Le film de nanomatériaux d'une épaisseur de l'ordre du nm est le meilleur exemple de ce type de matériaux. Les nanosheets et les nanowalls sont des matériaux nanostructurés en 2D. La surface du film peut atteindre plusieurs micromètres, mais son épaisseur reste de l'ordre du nm. La taille des matériaux nanostructurés en trois dimensions ($3D$) est hors de l'échelle nanométrique pour tous les nanomatériaux 3D [59–62].

1.3 Semi-conducteurs magnétiques dilués

1.3.1 Aperçu

Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) sont des alliages de semi-conducteurs non magnétiques dopés avec des éléments magnétiques. L'objectif est de créer des matériaux qui possèdent des propriétés semi-conductrices, mais qui possèdent également des propriétés magnétiques. Comme l'illustre la fig. 1.6, on peut considérer un semi-conducteur magnétique dilué comme un lien entre les semi-conducteurs non magnétiques, i.e. $GaAs$ ou $InAs$, et les semi-conducteurs magnétiques purs, i.e. les chalcogénures comme EuO ou les spinelles, par exemple $CdCr_2Se_4$. Dans un semi-conducteur ferromagnétique dilué, un petit nombre d'atomes du semi-conducteur sont remplacés par des dopants qui possèdent un grand moment magnétique. Les atomes dopants typiques sont des éléments 3d, tels que Fe , Cr ou Mn , ce qui permet d'obtenir des semi-conducteurs magnétiques dilués tels que

- Semi-conducteurs $II - VI$: $Cd_{1-x}Mn_xSe$, $Cd_{1-x}Mn_xTe$, $Zn_{1-x}Co_xTe$;
- semi-conducteurs $IV - VI$: $(Pb, Sn, Mn)Te$;
- semi-conducteurs $III - V$: $In_xMn_{1-x}As$, $Ga_xMn_{1-x}As$, $Ga_xMn_{1-x}N$.

Les propriétés des semi-conducteurs magnétiques dilués se répartissent en deux catégories : premièrement, les matériaux paramagnétiques qui possèdent un facteur g plus important, ces matériaux DMS peuvent être utilisés comme polariseur de spin pour l'injection de spin ; et deuxièmement, les matériaux ferromagnétiques où le couplage entre les moments magnétiques des dopants est suffisamment fort, de sorte qu'un état ferromagnétique est atteint.

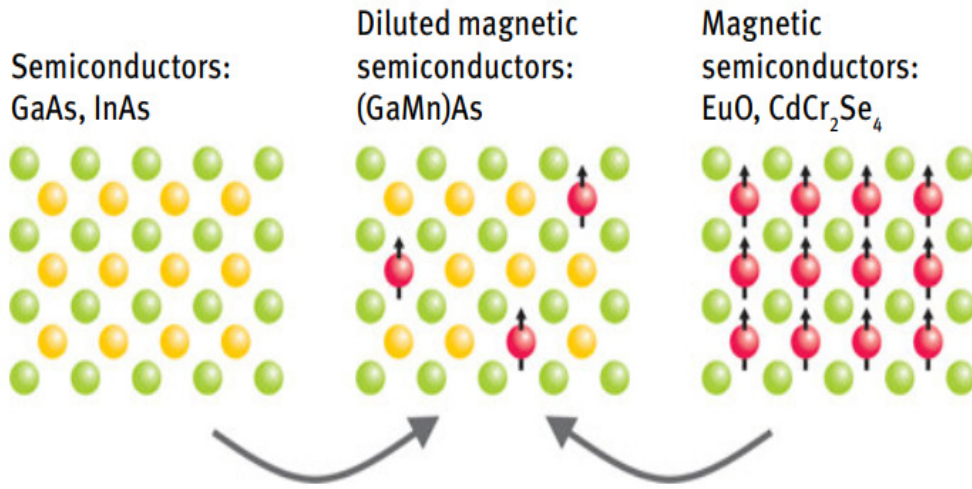


FIGURE 1.6 – Le semi-conducteur magnétique dilué peut être considéré comme un matériau intermédiaire entre le semi-conducteur pur et le semi-conducteur magnétique pur.

1.3.2 Semi-conducteurs magnétiques dilués III-V

Pour obtenir un semi-conducteur magnétique dilué $III - VI$, un métal de transition 3d peut être incorporé dans un semi-conducteur non magnétique [63]. Ces atomes magnétiques remplacent les éléments du groupe III dans le réseau cristallin. Par rapport aux semi-conducteurs magnétiques dilués $II - VI$, la solubilité des atomes magnétiques dans les matériaux $III - V$ est faible. Afin d'incorporer des atomes magnétiques dans les semi-conducteurs $III - V$ pour former un semi-conducteur magnétique dilué, la croissance cristalline doit être réalisée loin des conditions d'équilibre. Ceci peut être réalisé en utilisant l'épitaxie par faisceaux moléculaires (MBE). En raison de la faible solubilité, les couches sont produites à des températures plus basses que les couches

de semi-conducteurs III-V purs [64]. La fig. 1.7 présente un diagramme de phase de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ en fonction de la composition en Mn et de la température du substrat [65]. La zone au centre correspond à la phase métallique cristalline, qui est la plus intéressante pour les applications de dispositifs. Ici, les atomes de Mn sont incorporés sur un site cationique-substitutionnel. La zone de la phase métallique est entourée d'une phase isolante. Il s'agit ici d'effets de compensation, i.e. d'effets dus à l'incorporation d'atomes de métaux de transition sur des sites interstitiels. Au-delà d'environ 300 °C, la croissance d'une couche homogène de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ est inhibée, et les nanocristaux de $MnAs$ dans une matrice de $GaAs$ sont formés.

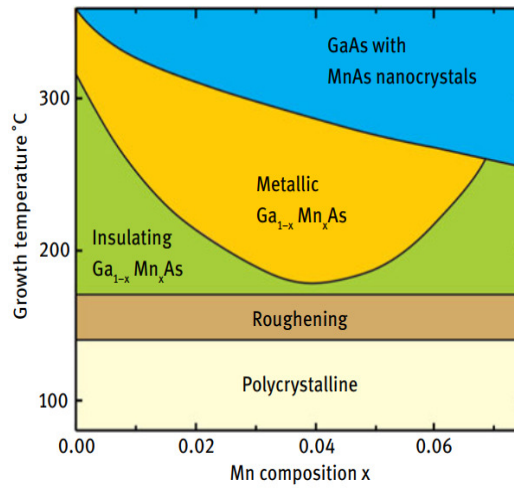


FIGURE 1.7 – Diagramme de phase du $Ga_{1-x}Mn_xAs$ obtenu par épitaxie par jets moléculaires. D'après Ohno et al [65]

Expérimentalement, on trouve une valeur moyenne de $S = 2,2$ [66], ce qui indique un mélange de moments magnétiques $Mn^{2+} : S = 5/2$ et $Mn^{3+} : S = 2$. L'origine des deux états différents du Mn est expliquée dans la fig. 1.8. Pour la liaison avec un atome sur un site du groupe III , trois électrons sont nécessaires : deux électrons de la couche $4s$ et un de la couche $3d$. Le moment magnétique de l'atome de manganèse est donc de $2\mu_B$. Dans un cristal, la contribution du moment angulaire orbital peut être négligée. L'énergie nécessaire pour remplir la couche $3d$ avec un électron supplémentaire provenant de la bande de valence est relativement faible. Dans ce cas, la couche $3d$ est remplie de cinq électrons, de sorte que le moment magnétique de l'atome de Mn est de $5/2\mu_B$. En même temps, un trou libre est créé dans la bande de valence. Par conséquent, dans les semi-conducteurs $III - V$, un atome de Mn sur un site de substitution agit

comme un accepteur, i.e. que la couche $Ga_{1-x}Mn_xAs$ est de type p . Cependant, en fonction des conditions de croissance, une plus grande fraction d'atomes de Mn peut également être incorporée sur des sites interstitiels dans le réseau $GaAs$. Dans ce cas, l'atome de Mn devient un double donneur. Par conséquent, la coexistence d'atomes de Mn sur des sites substitutifs et interstitiels conduit à une auto-compensation, i.e. à une réduction de la concentration de trous libres ou même à un état isolant (cf. fig. 1.7).

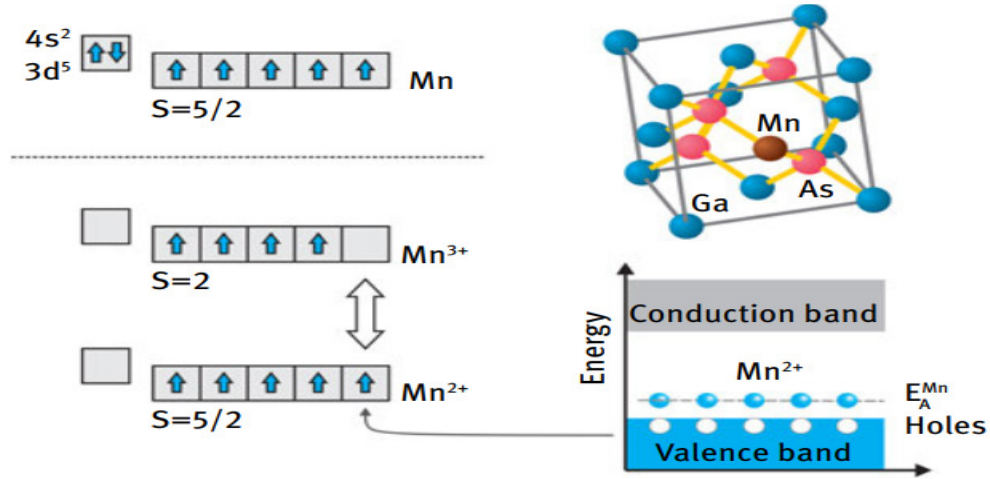


FIGURE 1.8 – Incorporation de Mn dans un réseau semi-conducteur $III - V$ sur un site du groupe III .

Magnétisme et interaction spin-orbite

2.1	Magnétisme dans les solides	19
2.1.1	Définitions et principes de base	19
2.1.2	Classification	19
2.2	Interaction spin-orbite	27
2.2.1	Origine de l'interaction spin-orbite	27
2.2.2	Effets Rashba et Dresselhaus	29
2.3	Techniques de résolution numérique de l'équation de Schrödinger	35
2.3.1	Model of determination of ground state	35
2.3.2	Approche Hartree-Fock	36
2.3.3	Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT	37
2.3.4	Approximation de la fonction enveloppe	38
2.4	Partie théorique des propriétés thermodynamiques, magnétiques et magnétocaloriques	39
2.4.1	Propriétés thermodynamiques	39
2.4.2	Propriétés magnétiques	40
2.4.3	Propriétés magnétocaloriques	40

2.1 Magnétisme dans les solides

2.1.1 Définitions et principes de base

Les matériaux magnétiques, en particulier les matériaux métalliques, sont très importants pour les technologies de l'information de pointe. Jusqu'à présent, ces matériaux sont principalement utilisés pour le stockage des données, alors que le traitement des données est principalement effectué par des matériaux semi-conducteurs. Les applications typiques des matériaux magnétiques sont les disques durs pour le stockage de masse ou les mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM) comme mémoires non volatiles. Dans les dispositifs spintroniques à semi-conducteurs, les matériaux magnétiques sont principalement utilisés comme injecteurs et détecteurs de spin. Nous présenterons ci-dessous la physique de base des matériaux magnétiques en commençant par le para et le diamagnétisme et en discutant finalement de la phase ferromagnétique et antiferromagnétique. Les propriétés générales de ces états magnétiques sont également pertinentes pour décrire les caractéristiques des semi-conducteurs magnétiques dilués.

2.1.2 Classification

Il existe de nombreux phénomènes différents liés au magnétisme. Leur point commun est leur nature purement mécanique quantique. Les différents phénomènes sont résumés dans le schéma de la fig. 2.1. Tout d'abord, on peut faire la distinction entre le magnétisme provenant d'électrons liés dans une coquille et celui provenant d'électrons conducteurs libres. Dans les deux cas, la réponse à un champ extérieur peut être soit paramagnétique, avec $\chi > 0$, soit diamagnétique, avec $\chi < 0$. Les deux phénomènes peuvent exister en même temps. Dans le cas paramagnétique, les moments magnétiques existants sont alignés dans le champ, tandis que dans le cas diamagnétique, des courants à contre-courant sont générés et font écran au champ. Pour une interaction électron-électron suffisamment forte, des transitions de phase peuvent se produire. L'état ferromagnétique ou antiferromagnétique en sont des exemples typiques.

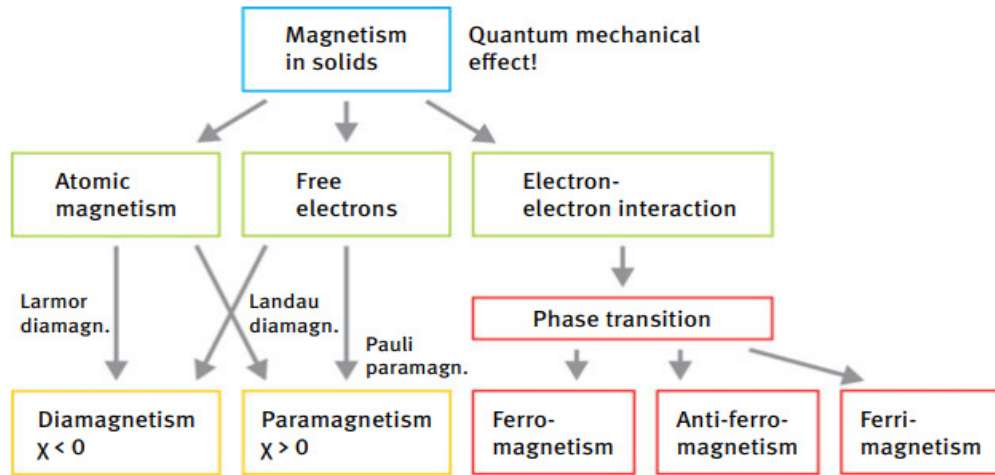


FIGURE 2.1 – Présentation des propriétés et des phénomènes magnétiques dans les matériaux à l'état solide.

Matériaux diamagnétiques

Les matériaux diamagnétiques sont des matériaux non magnétiques qui ne conservent aucun champ magnétique après le retrait d'un champ magnétique externe (fig. 2.2). Ils se caractérisent par une susceptibilité négative ($\chi_m < 0$) (fig. 2.3), ce qui signifie qu'ils ont tendance à s'éloigner d'un champ magnétique. Le moment magnétique dans les matériaux diamagnétiques provient du mouvement orbital des électrons autour des noyaux atomiques. En l'absence d'un champ magnétique externe, les électrons dans les matériaux diamagnétiques sont répartis uniformément, annulant tout moment magnétique [67].

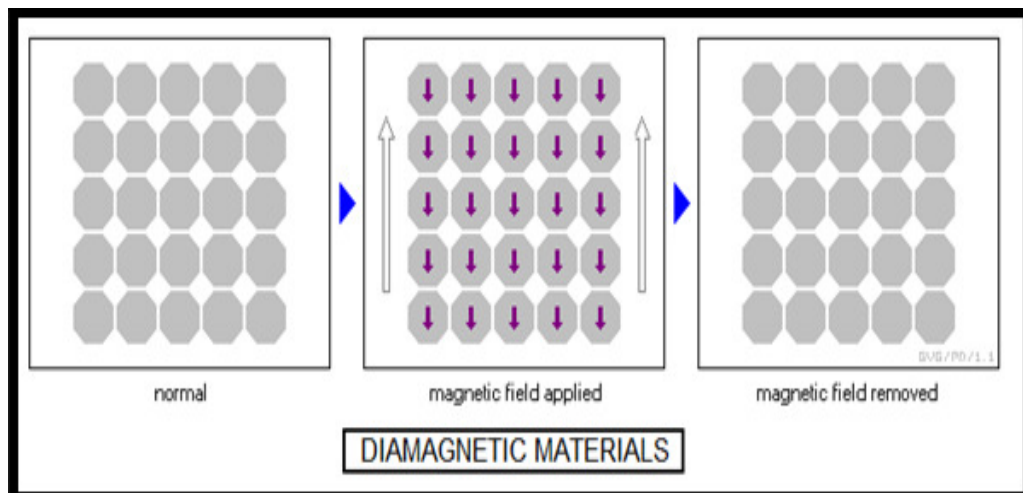


FIGURE 2.2 – Matériaux diamagnétiques en fonction de champ magnétique h .

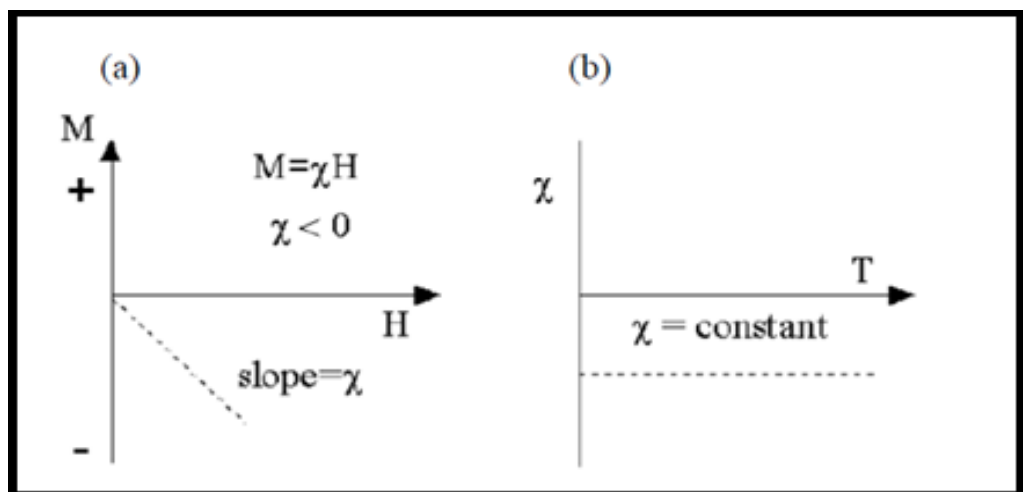


FIGURE 2.3 – Propriétés magnétiques des matériaux diamagnétiques selon : a) le champ et b) la température.

La figure 2.3(a) montre que lorsque le champ magnétique est nul. D'après la fig. 2.3(b), dans le cas des matériaux diamagnétiques, la susceptibilité magnétique est indépendante de la température T . Dans les diamagnétiques, $\chi = -10^{-5}$ (supraconducteur $\chi = -1$) et quelques exemples sont Cu , Ag , Au , Bi , Be , etc.

Matériaux paramagnétiques

Les matériaux paramagnétiques sont des matériaux qui sont faiblement attirés par un champ magnétique (fig. 2.4). Ils ont une susceptibilité positive ($\chi_m > 0$) (fig. 2.5)

et conservent une petite quantité de moment magnétique même après le retrait d'un champ magnétique externe. Des exemples de matériaux paramagnétiques comprennent l'aluminium (*Al*), le platine (*Pt*) et le titane (*Ti*). Le moment magnétique dans les matériaux paramagnétiques provient de la rotation des électrons non appariés. En présence d'un champ magnétique externe, les rotations des électrons non appariés s'alignent dans la direction du champ, résultant en un moment magnétique net.

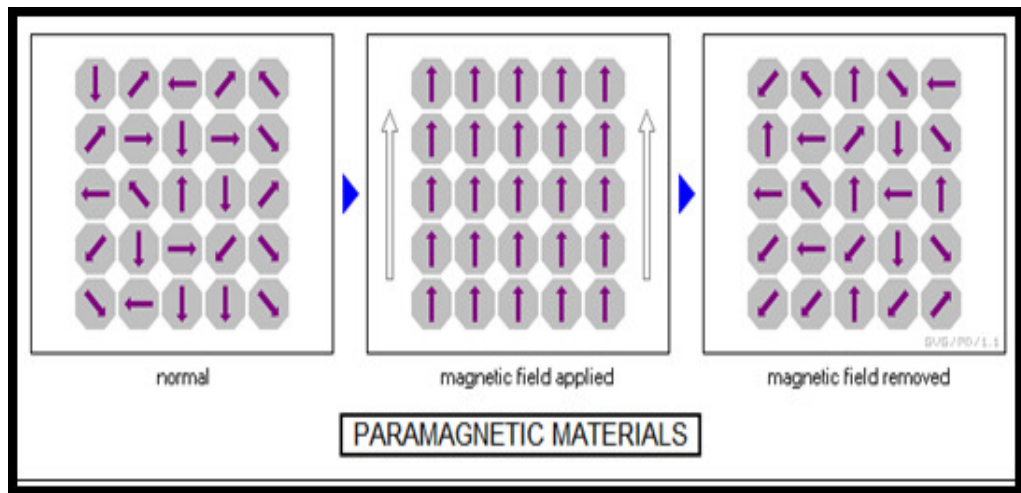


FIGURE 2.4 – Comportement des matériaux paramagnétiques sous l'effet d'un champ magnétique.

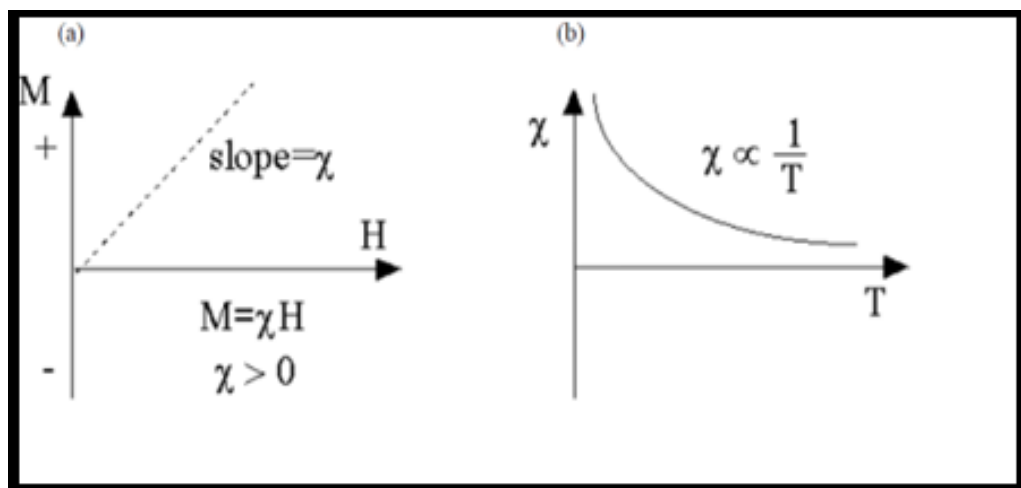


FIGURE 2.5 – Effet du champ magnétique et de la température sur les propriétés des matériaux paramagnétiques.

D'après la fig. 2.5(a), la susceptibilité magnétique est positive lorsque $\chi = 10^{-3} \sim$

10^{-5} , l'aimantation des paramagnétiques est faible, mais alignée parallèlement à la direction du champ magnétique. La fig. 2.5(b) indique une susceptibilité magnétique dépendant de la température, également connue sous le nom de loi de Curie. L'augmentation de la température s'oppose à l'alignement des dipôles magnétiques, ce qui a permis d'établir la relation inverse entre la température et la susceptibilité magnétique. Des exemples de paramagnétiques sont *l'Al*, le *Pt* et le *Mn*, etc.

Des études empiriques ont confirmé l'existence d'une relation inverse entre l'aimantation des matériaux paramagnétiques et la température absolue T . Cette relation peut s'exprimer mathématiquement de la manière suivante :

$$M = C \frac{B_0}{T} \quad (2.1)$$

$$\chi = C \frac{\mu_0}{T} \quad (2.2)$$

Appelée loi de Curie, ce principe fondamental tire son nom de Pierre Curie (1859-1906), éminent physicien à l'origine de sa découverte. Le paramètre C , également connu sous le nom de constante de Curie, joue un rôle essentiel dans cette loi. Il convient de souligner que la χ_m et μ_r des substances paramagnétiques dépendent non seulement des caractéristiques intrinsèques du matériau lui-même, mais aussi de la température de l'échantillon étudié. Lorsque l'intensité du champ magnétique augmente ou que la température diminue, l'aimantation des matériaux paramagnétiques connaît une amplification progressive jusqu'à atteindre un état de saturation appelé M_s . À ce stade critique, tous les dipôles à l'intérieur du matériau s'alignent parfaitement avec le champ magnétique appliqué. Il est néanmoins essentiel de reconnaître qu'au-delà de ce seuil de saturation, la validité de la loi de Curie (équation 2.2) est considérablement limitée.

Matériaux ferromagnétiques

Les matériaux ferromagnétiques sont des matériaux qui conservent une quantité significative de moment magnétique même après le retrait d'un champ magnétique externe. Ils ont une susceptibilité positive ($\chi_m > 0$) qui est beaucoup plus grande que celle des matériaux paramagnétiques. Des exemples de matériaux ferromagnétiques comprennent le fer (*Fe*), le nickel (*Ni*) et le cobalt (*Co*). Le moment magnétique dans les matériaux ferromagnétiques provient de l'alignement des rotations des électrons

dans le matériau. En l'absence d'un champ magnétique externe (fig. 2.6), les rotations des électrons dans les matériaux ferromagnétiques sont aléatoires, entraînant un moment magnétique nul. Cependant, en présence d'un champ magnétique externe, les rotations des électrons s'alignent dans la direction du champ, résultant en un moment magnétique. Les matériaux ferromagnétiques sont également caractérisés par la présence des domaines, qui sont des régions dans le matériau où les rotations des électrons sont alignées dans la même direction [68, 69].

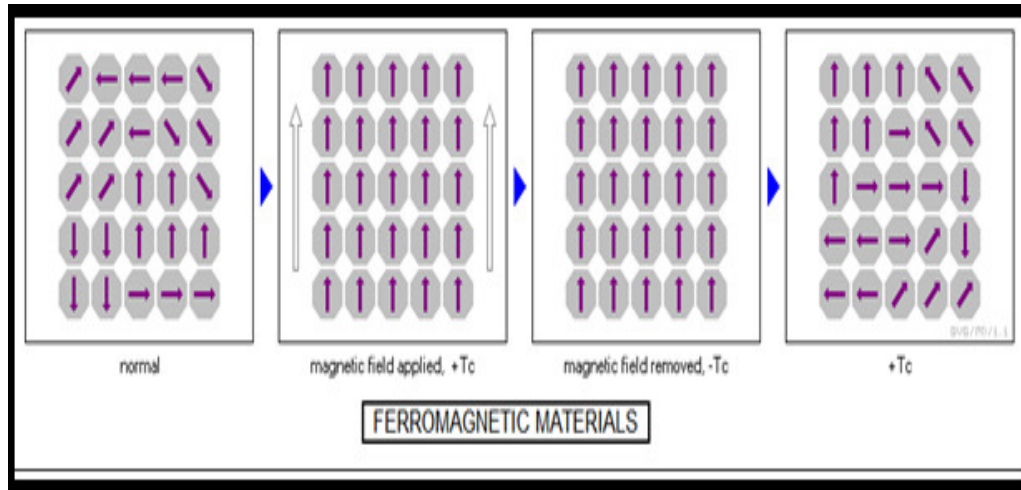


FIGURE 2.6 – Aimantation des matériaux ferromagnétiques sous l'effet d'un champ magnétique externe ou non.

Cependant, la température joue un rôle important dans les propriétés magnétiques des matériaux ferromagnétiques. À une certaine température, appelée T_c , les matériaux ferromagnétiques perdent leur propriété d'aimantation permanente et deviennent paramagnétiques [69]. À cette température, les moments magnétiques des atomes se désalignent et l'aimantation du matériau disparaît.

La susceptibilité au-dessus de la température de Curie, comme illustré dans la fig. 2.7, c'est-à-dire dans la phase paramagnétique, est décrite par l'expression suivante :

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} (T > T_c) \quad (2.3)$$

La température de Curie T_c dépend du matériau et peut être déterminée expérimentalement. Elle est également influencée par la présence d'impuretés ou d'autres éléments dans le matériau. En dessous de la température de Curie, les matériaux ferromagnétiques présentent une saturation de l'aimantation, c'est-à-dire que l'aimantation atteint

une valeur maximale pour un champ magnétique donné et ne peut pas être augmentée davantage. La saturation de l'aimantation, qui correspond au point où l'aimantation d'un matériau ne peut plus être augmentée par l'application d'un champ magnétique, dépend des propriétés intrinsèques du matériau, telles que la densité de spin et le moment magnétique.

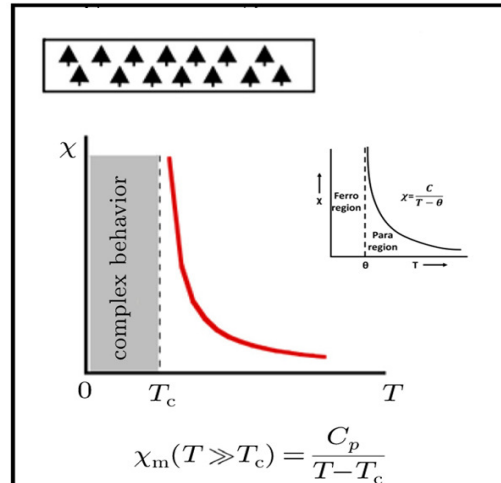


FIGURE 2.7 – Susceptibilité magnétique d'un matériau ferromagnétique en fonction de la température.

Matériaux Antiferromagnétiques

Les matériaux antiferromagnétiques sont des matériaux magnétiques qui présentent une structure magnétique ordonnée dans laquelle les moments magnétiques de deux sous-réseaux adjacents sont antiparallèles [70], c'est-à-dire qu'ils s'annulent mutuellement en moyenne macroscopique.

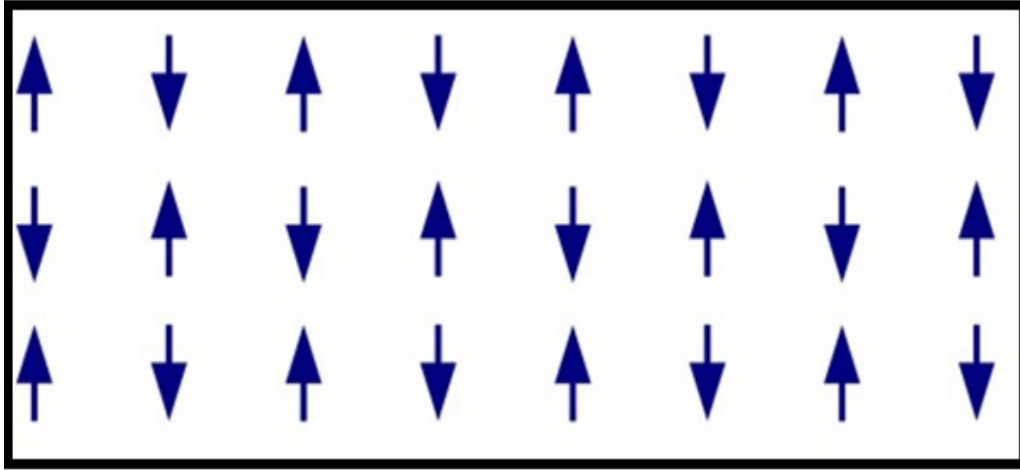


FIGURE 2.8 – Ordre antiferromagnétique refroidi en dessous de la température de Néel ($T < T_N$).

La température de Néel est une température critique pour les matériaux antiferromagnétiques [71], en dessous de laquelle les moments magnétiques des sous-réseaux antiferromagnétiques se verrouillent dans une configuration ordonnée. Cette transition de phase est appelée transition de Néel. À cette température, l'entropie du système diminue brusquement, ce qui se traduit par une augmentation de la susceptibilité magnétique. Au-dessus de la température de Néel, les matériaux antiferromagnétiques ont des moments magnétiques désordonnés (fig. 2.9).

Les matériaux antiferromagnétiques peuvent réagir de manière complexe à l'application d'un champ magnétique externe en fonction de la direction et de l'intensité du champ, ainsi que de la structure magnétique du matériau. Par exemple, un champ magnétique appliqué perpendiculairement au plan de la structure magnétique peut provoquer une rotation des moments magnétiques des sous-réseaux antiferromagnétiques dans des directions opposées, ce qui peut entraîner une polarisation magnétique nette. Cependant, cette polarisation est réversible et disparaît lorsque le champ magnétique est supprimé.

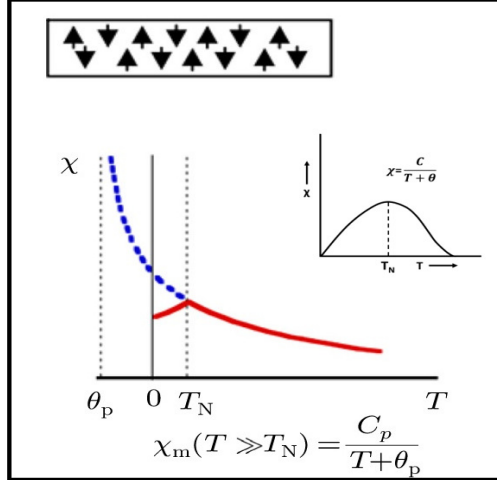


FIGURE 2.9 – Comportement de la susceptibilité en fonction de la température dans le contexte des matériaux Antiferromagnétiques.

2.2 Interaction spin-orbite

2.2.1 Origine de l'interaction spin-orbite

En général, en mécanique quantique non relativiste, où l'évolution d'un système représenté par un Hamiltonien donné est décrite par l'équation de Schrödinger, le spin de la particule et le mouvement du centre de masse sont séparés. Ainsi, ces degrés de liberté (internes et externes) sont indépendants à moins que des termes d'interaction supplémentaires ne soient introduits. En effet, de tels termes sont présents dans l'équation de Dirac [72] :

$$\begin{pmatrix} mc^2 - E + V & c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) & mc^2 + E - V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

qui décrit le mouvement d'un électron quantique de masse au repos m et d'énergie E dans un champ électromagnétique de potentiel vectoriel A et de potentiel scalaire V . Le vecteur de Pauli est donné par $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, où σ_i sont les matrices de Pauli :

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

En utilisant la théorie de perturbations, nous obtenons l'équation de Schrödinger avec les corrections dites relativistes :

$$\left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + mc^2 + H_Z + H_{SO} + H_T + H_D \right] \psi_+ = E\psi_+ \quad (2.6)$$

-couplage spin-orbite (SOC)[73] :

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})), \quad (2.7)$$

-correction relativiste de l'énergie cinétique

$$H_T = -\frac{1}{8m^3c^2}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^4, \quad (2.8)$$

-Terme de Darwin

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V(\mathbf{r}), \quad (2.9)$$

et le terme Zeeman qui décrit l'effet du champ magnétique $\mathbf{B}$ sur le spin ;

$$H_Z = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.10)$$

En l'absence de champ magnétique externe, le terme de spin-orbite se réduit à

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times (\mathbf{p})), \quad (2.11)$$

Cette contribution à l'Hamiltonien total est appelée terme spin-orbite de Pauli. Dans les potentiels à symétrie sphérique, H_{SO} prend une forme particulièrement simple. En utilisant le fait que $\vec{\nabla}V = (\vec{r}/r)dV/dr$, on obtient

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (2.12)$$

Le nom de couplage spin-orbite provient du produit $S.L$ qui apparaît dans la formule ci-dessus. Où $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ est le moment angulaire de spin et $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ le moment angulaire orbital. Le couplage spin-orbite peut être expliqué intuitivement en considérant que, selon la transformation de Lorentz, un champ électrique statique dans un référentiel de laboratoire (au repos) se transforme en une composition d'un champ électrique et d'un champ magnétique dans le référentiel d'un électron en mouvement. Le moment angulaire de spin de l'électron donne naissance à un moment magnétique qui se couple avec le champ magnétique. Le schéma simplifié est présenté à la fig. 2.10.

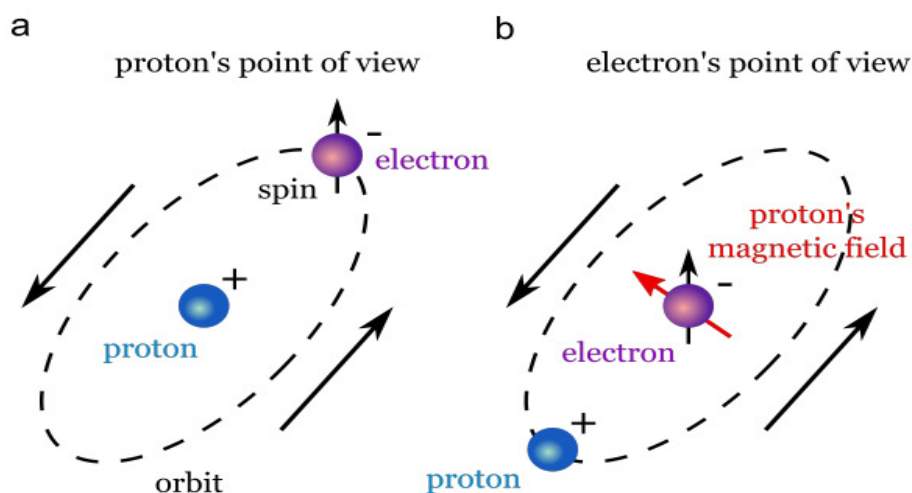


FIGURE 2.10 – Représentation semi-classique d'un électron dans un atome. (a) Dans le référentiel d'un proton immobile, l'électron se déplace dans le champ électrostatique des protons. (b) Dans le référentiel de l'électron tournant autour du proton, le mouvement apparent du proton crée un champ magnétique qui affecte le spin de l'électron.

2.2.2 Effets Rashba et Dresselhaus

Dans les systèmes semi-conducteurs, le mouvement du centre de masse des électrons est caractérisé par des fonctions d'onde de Bloch, et le spectre énergétique forme des bandes de Bloch. La structure des bandes électroniques est influencée par l'interaction spin-orbite qui, dans la matière condensée, provient du mouvement des électrons dans le potentiel cristallin périodique. Elle est représentée schématiquement à la fig. 2.11. Dans la description la plus simplifiée, on peut dire que, du point de vue de l'électron, les ions sont en mouvement et génèrent un champ magnétique qui se couple avec le spin de l'électron. En fait, l'interaction est beaucoup plus complexe et les formes de couplage dépendent des conditions, par exemple de la structure cristalline ou des propriétés de symétrie.

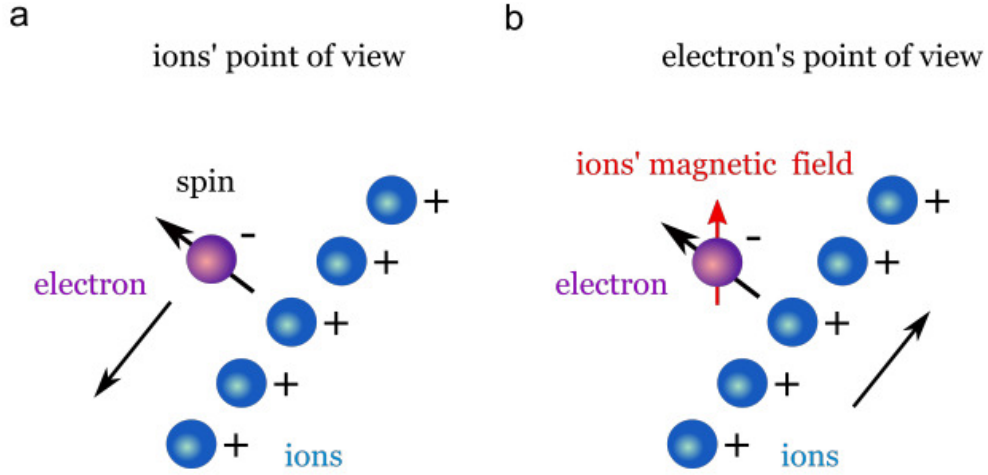


FIGURE 2.11 – Représentation semi-classique d'un électron dans un groupe d'ions. a Point de vue des ions. b Point de vue de l'électron.

Symétrie d'inversion spatiale

Considérons une structure cristalline avec un centre d'inversion. Un réseau représentatif est celui du diamant, comme le montre la fig. 2.12(a). Le cristal possède un centre d'inversion et présente donc une symétrie d'inversion spatiale. En raison de cette symétrie d'inversion spatiale du potentiel de réseau dans le hamiltonien, l'énergie des électrons doit être la même en cas d'inversion du vecteur k :

$$E_{\pm}(\vec{k}) = E_{\pm}(-\vec{k}) \quad (2.13)$$

Ainsi, les énergies des deux orientations de spin pour tout vecteur k sont dégénérées. Aucune séparation des niveaux d'énergie ne peut se produire pour des raisons de symétrie (fig. 2.12(c)).

Termes Rashba et Dresselhaus

Dans un réseau cristallin qui ne possède pas de centre d'inversion spatiale, par exemple un réseau de zinc blende, comme c'est le cas pour la plupart des semi-conducteurs $III-V$ (fig. 2.14(b)), les énergies d'une particule sous inversion du vecteur k ne sont plus égales :

$$E_{\pm}(\vec{k}) \neq E_{\pm}(-\vec{k}) \quad (2.14)$$

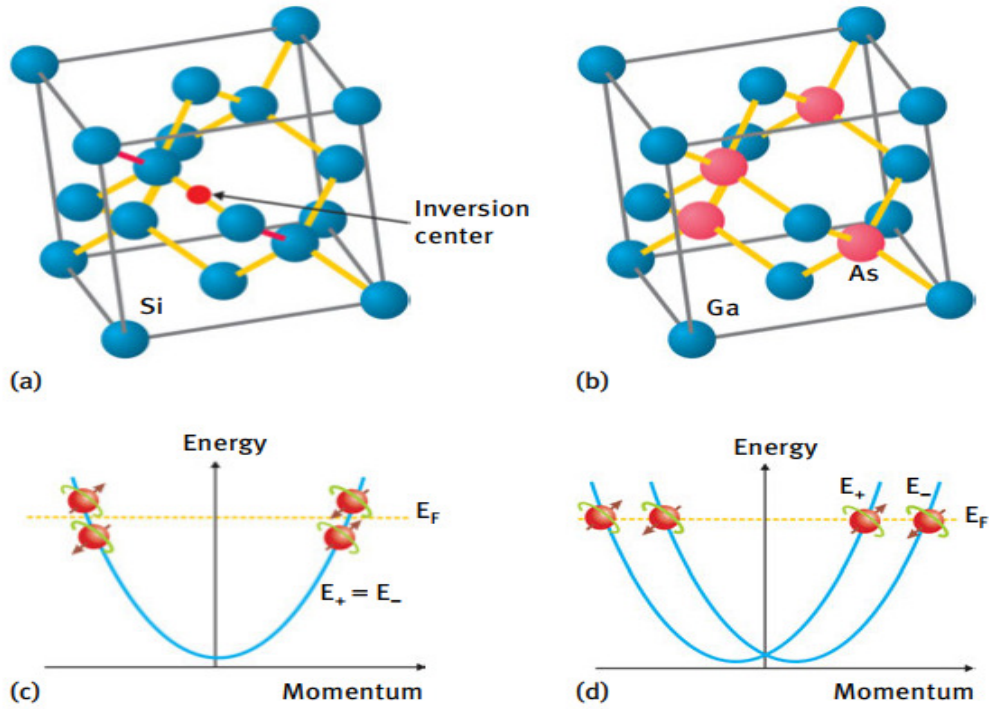


FIGURE 2.12 – a) Réseau de diamants avec un centre d'inversion situé entre deux atomes du réseau. b) Dans le cristal de zinc blende, il n'y a pas de centre d'inversion, car un site sur deux dans le réseau contient un atome différent. Les semi-conducteurs typiques avec une configuration de zinc blende sont *GaAs* ou *InAs*. c) Relation énergie-impulsion en cas de symétrie d'inversion, lorsque les états sont dégénérés en spin. d) Relation énergie-impulsion en cas d'absence de symétrie d'inversion, lorsque la dégénérescence en spin est levée.

Par conséquent, la dégénérescence de spin dans la bande de conduction est levée, comme illustré dans la fig. 2.14(d). Il résulte des considérations générales données ci-dessus que dans un réseau qui ne possède pas de centre d'inversion, une autre contribution à la séparation des spins est trouvée en plus de l'effet Rashba. Cette contribution est due au champ électrique interne du cristal, qui n'est pas annulé en raison de l'absence de symétrie d'inversion. Il en résulte un terme supplémentaire de couplage spin-orbite. Pour les cristaux de zinc blende, cette contribution est appelée le terme de Dresselhaus, ou terme d'asymétrie d'inversion massif [73].

En 1955, Gene Dresselhaus a publié un article [74] consacré aux composés *III – V* présentant une structure de mélange de zinc dépourvue de centre d'inversion. Il a

remarqué que dans de telles structures, le SOC proche du point Γ adopte la forme :

$$\hat{H}_D = \gamma \left((k_y^2 - k_z^2) k_x \sigma_x + \text{c.p.} \right), \quad (2.15)$$

où *c.p.* désigne les permutations circulaires d'indices et k_i les composantes du moment cristallin. Dans les nanostructures bidimensionnelles (avec z comme direction de confinement), la formule ci-dessus peut être réduite à la formule linéaire de Dresselhaus SOC :

$$\hat{H}_{D1} = \beta (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y), \quad (2.16)$$

où β est la constante de couplage, et nous avons négligé les termes du troisième ordre ou d'ordre supérieur dans k .

Quatre ans plus tard, Rashba et Sheka [75, 76] ont proposé une description du SOC dans les cristaux de type wurtzite. En outre, Vas'ko [77] et Bychkov et Rashba [78] ont étudié des puits quantiques dont la symétrie d'inversion structurelle est brisée le long de la direction de croissance et qui respectent la symétrie C_{2v} . Le terme SOC dans les Hamiltoniens de ces systèmes prend la forme suivante :

$$\hat{H}_R = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \quad (2.17)$$

où α est le paramètre de Rashba. Les effets de Dresselhaus et de Rashba correspondent tous deux à la division du spin en fonction de l'impulsion de bandes doublement dégénérées. Les textures de spin corotatives (fig. 2.14(a) - SOC de Rashba) et contre-rotatives (fig. 2.14(b) - SOC de Dresselhaus) résultent de ces termes Hamiltoniens.

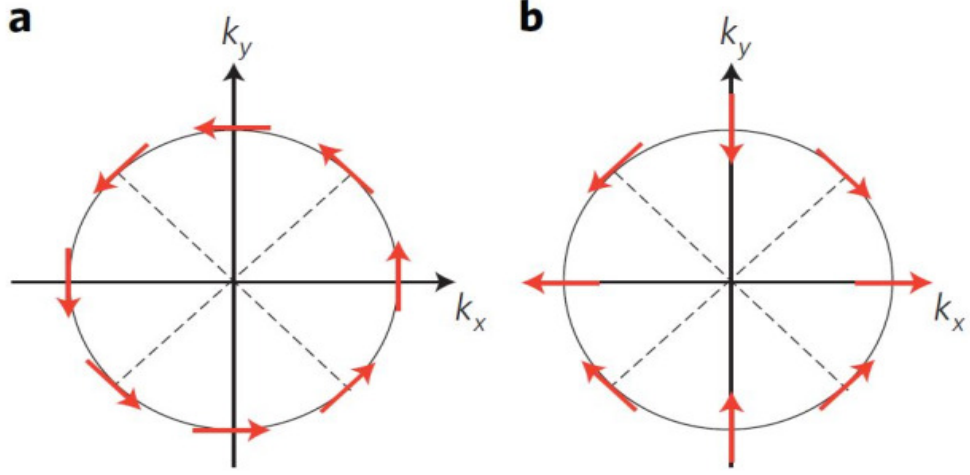


FIGURE 2.13 – Texture de spin à la surface de Fermi. a Texture de spin due à Rashba, b Couplage Dresselhaus SO linéaire lorsqu’une contrainte est appliquée le long de [001]. Figure d’après [15]

L’origine microscopique des termes spin-orbite de Dresselhaus est l’asymétrie d’inversion massive (BIA), qui est lié à l’absence de centre d’inversion dans la structure cristalline massive. Elle peut être affectée, par exemple, par la densité des porteurs de charge ou la température. La SOC de Rashba peut être appelée asymétrie d’inversion de structure (SIA) causée par une réduction supplémentaire de la symétrie : potentiel de confinement, déformation ou réduction de la symétrie introduite au cours du processus de croissance. Dans l’ensemble, la forme générale du SOC dans les systèmes électroniques 2D est donnée par la somme des couplages linéaires de Dresselhaus et de Rashba :

$$\hat{H}_{SOC} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \beta (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) + \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \quad (2.18)$$

Les dispersions de Rashba ($\alpha \neq 0, \beta = 0$) et de Dresselhaus ($\alpha = 0, \beta \neq 0$) sont présentées schématiquement dans les fig. 2.14 (a) et (b), respectivement.

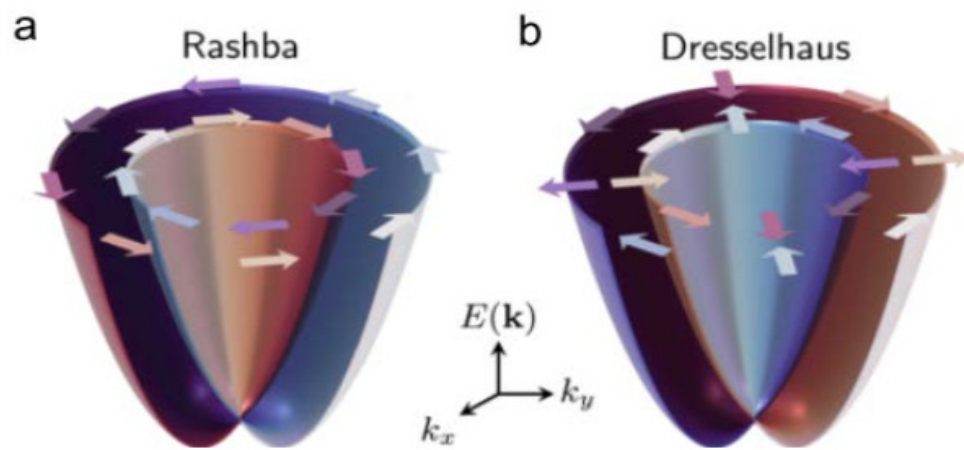


FIGURE 2.14 – (a) Relation de dispersion de Rashba et (b) Relation de dispersion de Dresselhaus avec la texture de spin représentée par les flèches en haut.

2.3 Techniques de résolution numérique de l'équation de Schrödinger

La description des propriétés de la matière à l'échelle atomique, d'un point de vue théorique, nécessite en principe la résolution de l'équation de Schrödinger du système à N corps. Cela pose le problème du nombre de particules impliquées dans le système. Le système électronique est décrit par la fonction d'onde, qui dépend à la fois des coordonnées spatiales (r) et de spin (σ) des électrons ainsi que des coordonnées spatiales (R) des noyaux atomiques. L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$H = - \sum_{I=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_I} \Delta_{R_I} - \sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r_k} - \sum_{I=1}^N \sum_{I>J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} - \sum_{k=1}^n \sum_{I=1}^N \frac{Z_I e^2}{|r_k - R_I|} + \sum_{k=1}^n \sum_{k'>k} \frac{e^2}{|r_k - r_{k'}|} \quad (2.19)$$

où N , M_I , Z_I et R_I représentent respectivement le nombre, la masse, la charge et la position d'un noyau, n , m , e et r_k sont leurs équivalents pour un électron. Les deux premiers termes de l'équation sont respectivement l'énergie cinétique du noyau (T_i) et l'énergie cinétique de l'électron (T_e), les trois derniers termes expriment les interactions coulombiennes noyau-noyau (V_{ii}), noyau-électron (V_{ie}) et électron-électron (V_{ee}). Nous allons essayer de résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

$$H\psi(r_1\sigma_1, \dots, r_n\sigma_n, R_1, \dots, R_N) = E\psi(r_1\sigma_1, \dots, r_n\sigma_n, R_1, \dots, R_N) \quad (2.20)$$

ψ et E sont la fonction d'onde et l'énergie du système. La recherche de l'état fondamental unique $|\psi_0\rangle$ peut être un problème très complexe. A de rares exceptions près, seules des déterminations approximatives (variationnelles par exemple) de $|\psi_0\rangle$ sont possibles.

2.3.1 Model of determination of ground state

L'approximation de Born-Oppenheimer est la première simplification qui permet de considérer le solide comme un ensemble d'électrons en interaction dans le potentiel d'un ensemble d'ions considérés comme statiques. Cependant, la solution de l'équation de Schrödinger reste très complexe dans la plupart des cas et nécessite généralement d'autres approximations basées sur des théories du champ moyen dans lesquelles les

électrons sont considérés comme indépendants ; l'un des exemples les plus connus étant l'approximation de Hartree-Fock.

2.3.2 Approche Hartree-Fock

Cette approche a été appliquée pour la première fois aux atomes en 1930 ; aucune approximation n'est faite sur l'Hamiltonien jusqu'à présent. D'autre part, on suppose que la fonction d'onde peut s'écrire sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$\psi_{el}(\{r\}) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_n(r_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(r_n) & \dots & \psi_n(r_n) \end{vmatrix} \quad (2.21)$$

C'est la façon la plus simple de respecter le principe d'exclusion de Pauli. La fonction d'onde étant normalisée, on peut montrer que l'énergie s'écrit :

$$E_{HF} = \langle \psi_{el}(\{r\}) | H | \psi_{el}(\{r\}) \rangle = \sum_i H_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (J_{ij} - K_{ij}) \quad (2.22)$$

avec

$$H_i = \int dr \psi_i^*(r) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ie}(r) + V_{ext}(r) \right] \psi_i(r)$$

$$J_{ij} = \frac{1}{2} \int \int dr dr' \psi_i(r) \psi_i^*(r) \frac{1}{|r' - r|} \psi_i^*(r') \psi_i(r') \quad (2.23)$$

$$K_{ij} = \frac{1}{2} \int \int dr dr' \psi_i(r) \psi_i^*(r) \frac{1}{|r' - r|} \psi_i^*(r') \psi_j(r') \delta(\sigma_i - \sigma_j) \quad (2.24)$$

avec le terme J_{ij} qui représente l'intégrale de Coulomb, déjà présentée dans l'approche de Hartree, tandis que K_{ij} est l'intégrale d'échange ou terme de Fock, qui découle de la nécessité d'une fonction d'onde antisymétrique, en tenant compte du terme de spin $\delta(\sigma_i - \sigma_j)$.

Pour la détermination des fonctions $\psi_i(r)$, nous utilisons le principe de minimisation de Rayleigh-Ritz pour l'énergie E_{HF} , avec la contrainte que les fonctions d'onde sont normalisées :

$$\delta(E_{HF}(r) - \sum_{i,j} \lambda_{i,j} (\langle \psi_i | \psi_i \rangle - \delta_{ij})) = 0 \quad (2.25)$$

Par une transformation unitaire, nous pouvons diagonaliser la matrice des multiplicateurs de Lagrange $\lambda_{i,j}$, ce qui conduit aux équations de Fock à un seul électron :

$$[T_e + V_{ie} + V_{Hartree} + V_{Fock}(\{\psi_{el}(r)\})] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (2.26)$$

where

$$V_{Hartree} = \sum_j \int dr' \psi_j(r) \psi_j^*(r) \frac{1}{|r' - r|}$$

$$V_{Fock} = - \left[\sum_j \int dr' \psi_j(r') \psi_j^*(r') \frac{1}{|r' - r|} \right] \frac{\psi_j(r)}{\psi_i(r)} \delta(\sigma_i - \sigma_j) \quad (2.27)$$

où nous identifions le paramètre lagrangien ε_i avec une énergie à un électron. Cet ensemble d'équations est autoconsistant (via le terme de Hartree et le terme de Fock non local).

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, nous utilisons une méthode d'approximation de la fonction d'onde, prenant en compte les effets physiques afin de la réduire à un problème monoélectronique. Cependant, nous avons vu que nous sommes limités par l'utilisation de cette approche. Nous pouvons utiliser une autre approche qui consiste à réduire le nombre de degrés de liberté du problème sans affecter l'Hamiltonien initial. C'est la philosophie des techniques dites ab-initio basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qui utilisent la densité électronique comme variable au lieu de la fonction d'onde.

2.3.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT

L'idée d'utiliser la densité comme variable au lieu de la fonction d'onde a été suggérée par Thomas et Fermi en 1927. Ils ont proposé de modéliser le terme cinétique de l'équation de Schrödinger par une densité fonctionnelle explicite particulière. Cette approche pose des problèmes majeurs (elle ne permet pas d'expliquer la liaison covalente par exemple) : plusieurs extensions ont été proposées, mais elles ont toutes l'inconvénient d'ajouter des termes au fur et à mesure que l'on considère des approximations successives (un souci déjà présent dans l'approche Hartree-Fock). Néanmoins, l'utilisation de la densité conduit à des résolutions plus simples que dans le cas de la fonction d'onde. L'approche de Hohenberg et Kohn a permis d'établir un cadre rigoureux permettant de s'affranchir de toute approximation. Selon cette approximation, l'Hamiltonien s'écrit :

$$E[n] = H_{HK}[n] + \langle \psi | V_{ext}(r) | \psi \rangle \quad (2.28)$$

où $H_{HK}[n] = T_e + V_{ee}$ est la fonction de Hohenberg-Kohn, et $V_{ext}[n]$ est l'énergie potentielle du champ externe. Pour un système de N électrons, la densité électronique

est définie par :

$$n(r) = 2N \int dr_1 \dots \int dr_{n-1} \psi^*(r_1, \dots, r_{n-1}, r) \psi(r_1, \dots, r_{n-1}, r) \quad (2.29)$$

Pour un potentiel externe donné et un nombre fixe d'électrons, l'état fondamental du système est le minimum global de la fonction $E[n]$.

$$E[n_0(r)] = \min_{n(r)} E[n(r)] \quad (2.30)$$

De la densité, on peut déduire $V_{ext}(r)$ et décrire toutes les propriétés du niveau fondamental du système; en particulier, son énergie et, donc, toutes les grandeurs dérivées associées.

2.3.4 Approximation de la fonction enveloppe

L'approximation de la fonction enveloppe, également appelée théorie de la masse effective, est largement utilisée pour les semi-conducteurs massifs; supposons que la structure de la bande présente un extremum à l'énergie E_{n0} , et que la bande est non dégénérée à cette énergie. En utilisant la théorie standard des perturbations non dégénérées, les fonctions u_{nk} et les valeurs propres E_{nk} d'un point voisin k peuvent être étendues au second ordre des termes de la fonction d'onde non perturbée u_{n0} et des énergies E_{n0} en traitant les termes impliquant k comme des perturbations.

$$u_{nk} = u_{n0} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle}{E_{n0} - E_{n'0}} u_{n'0} \quad (2.31)$$

et

$$E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle|^2}{E_{n0} - E_{n'0}}. \quad (2.32)$$

Les termes linéaires de k s'annulent car E_{n0} a été supposé être un extremum. Il est conventionnel d'exprimer l'énergie E_{nk} , pour de petites valeurs de k , comme suit

$$E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.33)$$

Où m^* est défini comme la masse effective de la bande. En comparant l'équation (2.32) avec l'équation (2.33), nous pouvons obtenir l'expression de cette masse comme suit

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n0} | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle|^2}{E_{n0} - E_{n'0}}. \quad (2.34)$$

La formule (2.34) peut être utilisée pour calculer la masse effective d'une bande non génératrice. En outre, elle montre qu'un électron dans un solide a une masse différente de celle d'un électron libre en raison du couplage entre les états électroniques dans différentes bandes via le terme $\mathbf{k.p}$. La théorie de la masse effective présente des caractéristiques remarquables : toute référence à la structure microscopique du semi-conducteur massif est condensée dans la masse effective m^* et l'énergie de bande. Une application simple de la théorie de la masse effective est la détermination des niveaux d'énergie d'une impureté dans un semi-conducteur. Dans ce cas, l'interaction coulombienne entre un électron et l'impureté apparaît dans l'équation de la fonction d'enveloppe par

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \right] F_n(r) = E F_n(r). \quad (2.35)$$

où e est la charge élémentaire et ϵ la constante diélectrique du semi-conducteur. L'ordre de grandeur de la constante diélectrique est de 10 à 15, ce qui réduit considérablement le potentiel $U(r)$ par rapport à l'atome d'hydrogène. C'est une équation facile à résoudre pour une masse effective et une constante diélectrique données dans le cas de la symétrie sphérique. Nous trouvons une énergie de liaison de l'ordre de 10 meV (si nous prenons la bande de conduction comme référence). C'est un triomphe pour cette théorie, puisque les mesures expérimentales donnent à peu près le même ordre de grandeur. C'est ce formalisme qui est à la base de tous nos travaux dans cette thèse. Nous utiliserons l'approximation de la masse effective pour calculer les énergies et les fonctions d'onde de structures de faible dimension, en particulier les boîtes quantiques.

2.4 Partie théorique des propriétés thermodynamiques, magnétiques et magnétocaloriques

2.4.1 Propriétés thermodynamiques

Rappelons que dans le cadre de la statistique de Boltzmann-Gibbs, les propriétés thermodynamiques et magnétiques seront calculés à l'aide de la fonction de partition canonique $Z_c = \sum_i e^{-\beta(E_i)}$ avec $\beta = 1/k_B T$, k_B est la constante de Boltzmann et T est la température en Kelvin. Les principales propriétés thermodynamiques du système peuvent être déduites en utilisant Z_c . Ainsi, l'énergie interne du système peut être

déduite à l'aide de l'expression

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z_c}{\partial T}. \quad (2.36)$$

La capacité thermique est calculée à l'aide de l'expression suivante :

$$C_v = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \right) \quad (2.37)$$

L'entropie, qui est considérée comme l'une des propriétés thermodynamiques les plus importantes, détermine le caractère aléatoire du système.

$$S = k_B \beta (\langle E \rangle - F_H) \quad (2.38)$$

Avec $F_H = -k_B T \ln Z_c$ représente l'énergie libre de Helmholtz indiquant le critère de stabilité.

2.4.2 Propriétés magnétiques

Nous rappelons que la détermination du degré d'aimantation d'un matériau donné soumis à un champ magnétique (B) est déterminé par la susceptibilité magnétique χ donnée par

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \quad (2.39)$$

Avec M est l'aimantation du système extraite de la relation statistique :

$$M = \frac{-1}{Z_c} \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial B} \exp(-\beta E_i). \quad (2.40)$$

2.4.3 Propriétés magnétocaloriques

L'effet magnétocalorique (EMC) est la réponse des moments magnétiques d'un matériau magnétique à l'action d'un champ magnétique externe à une température donnée. Sous l'effet d'un champ magnétique variable, l'EMC donne des informations sur les propriétés d'un matériau magnétique à changer de température ou à échanger de la chaleur avec un réservoir thermique. Deux quantités sont utilisées pour caractériser l'effet magnétocalorique : le potentiel magnétocalorique, ΔS_M , et le changement de température, $\Delta \mathcal{T}_{ad}$. Par conséquent, pour calculer la variation de l'entropie magnétique ΔS_M , l'entropie $S(B, \mathcal{T})$ est évaluée en présence et en l'absence d'un champ magnétique. La quantité ΔS_M pour un processus isotherme est donnée par [116] :

$$\Delta S_M(\mathcal{T}, B) = S(\mathcal{T}, B \neq 0) - S(\mathcal{T}, B = 0). \quad (2.41)$$

Et le changement de température adiabatique $\Delta\mathcal{T}_{ad}$ peut être extraite à l'aide de la relation :

$$\Delta\mathcal{T}_{ad}(\mathcal{T}, B) = -\mathcal{T} \frac{\Delta S_M(\mathcal{T}, B)}{C_v(\mathcal{T}, B)}. \quad (2.42)$$

Propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué, en présence du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon.

3.1	Introduction	43
3.2	Base théorique	44
3.3	Résultats et discussions	48
3.3.1	propriétés magnétiques	49
3.3.2	propriétés thermodynamiques	53
3.4	Conclusion	58

3.1 Introduction

Récemment, les progrès et la maîtrise des phénomènes liés au spin et à son interaction avec le mouvement du système électronique ouvrent certainement la voie aux nouvelles applications dans le domaine de la spintronique. En se basant sur le caractère de spin de la charge (électron et trou), ce domaine émergent des dispositifs spintroniques utilise comme principe l'interaction du mouvement de spin avec les orbites des porteurs dans les nanomatériaux semi-conducteurs, connue sous le nom d'interaction spin-orbite (SOI)[1–4]. Ce concept est très impressionnant dans les systèmes confinés et ouvre la voie à la découverte d'autres propriétés extraordinaires, notamment dans le domaine de l'optoélectronique et des phénomènes de transport, telles que le Qbit pour la mémoire et l'informatique, les LED à spin, les batteries à spin, et bien d'autres dispositifs[5].

De manière générale, le concept d'interaction spin-orbite (SOI) peut être considéré comme le résultat du comportement collectif des porteurs de charge et du spin dans les systèmes asymétriques. Ce couplage peut se produire dans deux situations : La première correspond au SOI de Dresselhaus (DSOI) qui apparaît dans le cas d'une asymétrie d'inversion globale qui correspond à une croissance cristalline non centrosymétrique comme dans les structures cristallines III-V et II-VI de Zinc Blende et de Wurtzite[6]. La deuxième situation est connue sous le nom de Rashba SOI (RSOI) et ne se produit que dans les structures de faible dimension. Elle est causée par l'asymétrie au cours du processus de croissance, en particulier dans l'hétérostructure, ou par une perturbation externe[7]. Ces deux effets provoquent des changements importants dans les propriétés optoélectroniques, thermodynamiques et magnétiques des nanomatériaux. Ils sont également très sensibles aux changements de symétrie induits par le caractère polaire des matériaux (effets polaroniques) ou par des perturbations externes telles que le confinement, la température, les champs magnétiques et électriques.

En général, pour comprendre le comportement collectif des électrons, il est très pratique de traiter le problème de deux électrons en interaction. Le système de deux électrons est considéré comme l'un des systèmes quantiques les plus attractifs. L'étude des propriétés de quelques électrons dans les boîtes quantiques (généralement appelées atomes artificiels) a fait l'objet de nombreuses recherches expérimentales [16–19] et

théoriques [20–23].

Nous rappelons que dans des matériaux tels que le GaN et l’InAs, l’effet polaronique peut influencer les propriétés optoélectroniques et thermodynamiques. Il est bien connu que les interactions électron-phonon dépendent fortement de la polarité des matériaux. Bien que ces interactions soient plus faibles que les interactions coulombiennes électron-électron, elles sont comparables aux interactions spin-orbite. Les études sur les propriétés optoélectroniques, thermodynamiques et magnétiques des QDs en présence d’interactions électron-phonon sont très peu nombreuses.

Le but de cette étude est de montrer que la prise en compte du couplage *électron*-phonon dans les structures bidimensionnelles est inévitable. Ce couplage n’est pas seulement important du point de vue de la physique fondamentale mais aussi pour montrer que les vibrations du réseau sont importantes même à basse température. Dans ce chapitre, nous nous focalisons sur l’effet du couplage *électron*-phonon et de RSOI sur diverses propriétés magnétiques et thermodynamiques. Ainsi, nous analysons en détail les propriétés thermodynamiques et magnétiques des structures quantiques 2D à deux électrons en tenant compte de l’interaction électron-électron couplés par un potentiel coulombien en présence de RSOI et de couplage *électron*-phonon. Ce chapitre est organisé comme suit : d’abord, nous décrivons les détails du modèle théorique réalisé dans le cadre de l’approximation de la masse effective et en utilisant l’approche de Fröhlich pour la partie polaronique. Les niveaux d’énergie des états fondamentaux et excités sont déterminés numériquement et sont ensuite utilisés pour obtenir toutes les propriétés thermodynamiques et magnétiques en considérant l’approche d’ensemble canonique, puis on discute les effets de confinement, de champ magnétique, de Rashba spin-orbite et de l’interaction avec les LO-phonons sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques du système.

3.2 Base théorique

Nous commençons par décrire notre approche théorique pour déterminer les niveaux d’énergie de deux électrons en interaction confinés dans une boîte quantique et soumis à un champ magnétique perpendiculaire $\vec{B} = (0, 0, B)$ qui est défini dans la jauge de Lorentz par le potentiel vectoriel $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$. En prenant en compte du couplage

Rashba spin-orbite et de l'interaction avec les LO-phonons, l'énergie du système est calculée en résolvant l'équation de Schrödinger $\hat{\mathcal{H}}|i\rangle = E_i|i\rangle$, où $\hat{\mathcal{H}}$ est l'Hamiltonien, qui est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_c + \mathcal{H}_R^{SO} + \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_{e-ph} \quad (3.1)$$

Dans l'équation (3.1), H_0 est l'Hamiltonien des deux électrons en interaction, défini comme suit

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m_e^*} \sum_{i=1}^2 \left(\vec{P}_i + \frac{e\vec{A}_i}{c} \right)^2 + \sum_{i=1}^2 V_w(r_i) \quad (3.2)$$

Où m_e^* est la masse effective de l'électron, e est la charge de l'électron et $\vec{P}_i$ est le momentum de l'électron i . Dans cette étude, nous supposons que le confinement est décrit par un potentiel parabolique, $V_w(r_i)$ donné par

$$\sum_{i=1}^2 V_w(r_i) = \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 \sum_{i=1}^2 r_i^2 \quad (3.3)$$

where $\hbar\omega_0$ est la force de confinement. Le potentiel coulombien est donné par $V_c = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$, où ε_∞ est la constante diélectrique à haute fréquence. Le troisième terme $\mathcal{H}_R^{SO}$ représente l'Hamiltonien du Rashba spin-orbite, exprimé comme suit [92] :

$$\mathcal{H}_R^{SO} = \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{i=1}^2 \left[\hat{\sigma}_i \times \left(\hat{P}_i + \frac{e\hat{A}_i}{c} \right) \right] = \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{i=1}^2 \left[\hat{\sigma}_{x,i} \left(\hat{P}_{y,i} + \frac{e\hat{A}_{y,i}}{c} \right) - \hat{\sigma}_{y,i} \left(\hat{P}_{x,i} + \frac{e\hat{A}_{x,i}}{c} \right) \right] \quad (3.4)$$

α_R est la constante de couplage de Rashba, c est la vitesse des ondes électromagnétiques dans le vide et σ_x, σ_y et σ_z sont les matrices de Pauli.

Le quatrième terme de l'équation. 3.1 est le terme de Zeeman :

$$\mathcal{H}_Z = \frac{1}{2} g^* \mu_B B \sum_{i=1}^2 \sigma_{z,i} \quad (3.5)$$

g^* est le facteur de Landé de l'électron et $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ est le magnéton de Bohr. En utilisant le formalisme de Fröhlich [35–37], les deux derniers termes de l'équation 3.1 décrivent l'opérateur cinétique des phonons

$$\mathcal{H}_{ph} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} \quad (3.6)$$

Où $\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger (\hat{a}_{\vec{q}})$ est l'opérateur de création (destruction) du phonon avec le vecteur d'onde $\vec{q}$ et l'hamiltonien représentant le couplage *electron* -phonon :

$$\mathcal{H}_{e-ph} = \sum_{\vec{q}} \left[\hat{a}_{\vec{q}} V_{\vec{q}} (\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_2)) + h.c \right] \quad (3.7)$$

avec $V_{\vec{q}}$ est le coefficient de couplage électron-phonon est donné par

$$V_{\vec{q}} = \left[\frac{2\pi e^2}{V} \frac{\hbar\omega_{LO}}{q^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \right]^{1/2} \quad (3.8)$$

Où V est le volume du cristal et ε_0 est la constante diélectrique statique.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger $\mathcal{H}|i\rangle = E_i|i\rangle$, nous introduisons les paramètres relatifs et du centre de masse (CM) : ($\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ et $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$ pour les coordonnées, $\mu = m_e^*/2$ et $M_0 = 2m_e^*$ pour les masses).

Grâce à la transformation de Lee Low Pines (LLP) [33, 34], la contribution polaronique peut être simplifiée et l'expression totale de l'Hamiltonien donnée par l'équation (eq 3.1) adopte la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ee} = & \frac{P_r^2}{2\mu} + \frac{e^2}{\varepsilon_\infty r} + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 r^2 + \frac{1}{2}\omega_c L_z \\ & + \frac{P_R^2}{2M_0} + \frac{1}{2}M_0\Omega^2 R^2 + \frac{1}{2}\omega_c L_Z + \frac{\alpha_R}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} + g^* \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ & + \alpha_{LO} \hbar\omega_{LO} - \frac{2\alpha_{LO}\hbar\omega_{LO}}{u_{LO}r} (1 - \exp(-u_{LO}r)) - \alpha_{LO} \hbar\omega_{LO} \exp(-u_{LO}r) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Où $\Omega^2 = \frac{\omega_c^2}{4} + \omega_0^2$, $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$. $L_z = m\hbar$ et $L_Z = M\hbar$ sont les composantes du moment angulaire de la partie relative et de la partie du CM respectivement, m et M sont les nombres quantiques du moment angulaire de la partie relative et de la partie de CM respectivement. m et M peuvent prendre les valeurs suivantes $0, \pm 1, \pm 2, \dots$. La dimension des deux électrons en interaction $\frac{1}{u_{LO}}$ et la constante de couplage électron-phonon α_{LO} sont définies, respectivement, comme suit

$$u_{LO} = \sqrt{\frac{2M_0\omega_{LO}}{\hbar}}, \alpha_{LO} = \frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{2M_0\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right). \quad (3.10)$$

L'Hamiltonien de l'équation 3.9 est une somme de deux parties indépendantes : $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{rel} + \mathcal{H}_{CM}$ et par conséquent l'énergie du système est $E = E_{rel} + E_{CM}$. Par conséquent, nous pouvons écrire :

$$\mathcal{H}_{rel} = \mathcal{H}_{rel}^0 + V_{e-ph}^{int} \quad (3.11)$$

Avec

$$\mathcal{H}_{rel}^0 = \frac{P_r^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 r^2 + \frac{1}{2}\omega_c L_z \quad (3.12)$$

et

$$V_{e-ph}^{int} = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty r} - \frac{2\alpha_{LO}\hbar\omega_{LO}}{u_{LO}r} (1 - \exp(-u_{LO}r)) - \alpha_{LO} \hbar\omega_{LO} \exp(-u_{LO}r) \quad (3.13)$$

Dans le cadre de cette approche, la fonction d'onde $\psi_{n,m}(r, \phi)$ correspondant au mouvement relatif est donnée par

$$\psi_{n,m}(r, \phi) = \exp(im\phi) f_{n,m}(r) \quad (3.14)$$

Où

$$f_{n,m}(r) = \left(\frac{2a^2 n!}{(n + |m|)!} \right)^{1/2} (ar)^{|m|} L_n^{|m|}(a^2 r^2) \exp(-a^2 r^2/2) \quad (3.15)$$

où $a = \sqrt{\frac{\mu\Omega}{\hbar}}$ est l'inverse de la taille effective de la boîte quantique, qui indique à la fois le degré de confinement causé par la taille et l'effet du champ magnétique. $L_n^{|m|}(a^2 r^2)$ est le polynôme de Laguerre.

Dans les unités donneuses relatives $a^* = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}$ pour la longueur et $R^* = \frac{\hbar^2}{2\mu a^{*2}}$ pour l'énergie, E_{rel}^0 peut être déterminée exactement par la résolution : $\mathcal{H}_{rel}^0 f_{n,m}(r) = E_{rel}^0 f_{n,m}(r)$. Elle s'écrit comme :

$$E_{rel}^0 = 2\gamma_1(2n + |m| + 1) + m\gamma_2 \quad (3.16)$$

Où $\gamma_1 = \frac{\hbar\Omega}{2R^*}$ and $\gamma_2 = \frac{\hbar\omega_c}{2R^*}$.

En considérant le couplage *électron*-phonon, l'énergie relative peut être déterminée en calculant l'expression complète de l'énergie :

$$E_{rel} = 2\gamma_1(2n + |m| + 1) + m\gamma_2 + \langle f_{n,m} | V_{e-ph}^{int}(r) | f_{n',m'} \rangle \quad (3.17)$$

où la valeur moyenne de l'interaction *électron-électron* et de l'interaction *électron*-phonon est obtenue en déterminant les éléments de la matrice :

$$\langle \psi_{n,m} | V_{e-ph}^{int}(r) | \psi_{n',m'} \rangle = \int_0^\infty r f_{n,m}^*(r) V_{e-ph}^{int}(r) f_{n',m'}(r) \delta_{nn'} \delta_{mm'} dr \quad (3.18)$$

$\delta_{nn'}$ et $\delta_{mm'}$ sont les symboles de Kronecker delta.

D'autre part, l'Hamiltonien du CM est exprimé par les opérateurs suivants :

$$\mathcal{H}_{CM} = \frac{P_R^2}{2M_0} + \frac{1}{2}M_0\Omega^2 R^2 + \frac{1}{2}\omega_c L_Z + \frac{\alpha_R}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} + g^* \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Où $\mathcal{H}_{12}$ et $\mathcal{H}_{21}$ sont les expressions obtenues par le développement des éléments de matrice du terme de Rashba donné comme suit :

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{12} = \hbar e^{-i\Phi} \left[\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \Phi} + \frac{eB}{c} R \right] \\ \mathcal{H}_{21} = \hbar e^{+i\Phi} \left[-\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \Phi} + \frac{eB}{c} R \right] \end{cases} \quad (3.20)$$

En considérant une fonction d'onde comme le produit du terme angulaire et radial indépendants :

$$\Psi_{N,M}(R, \Phi) = \begin{cases} U_N(R)e^{iM\Phi} \\ V_N(R)e^{i(M+1)\Phi} \end{cases} \quad (3.21)$$

N et M sont les nombres quantiques principal et magnétique des états du CM.

Dans ces conditions, l'Hamiltonien prend la forme suivante :

$$-\frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + k^2 \frac{M^2}{R^2} + 16\gamma_1^2 R^2 \right) U_N(R) + \alpha \left(\frac{\partial}{\partial R} + \frac{M+1}{R} + 2\gamma_2 R \right) V_N(R) = 0 \quad (3.22)$$

$$-\frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + q^2 \frac{(M+1)^2}{R^2} + 16\gamma_1^2 R^2 \right) V_N(R) + \alpha \left(\frac{\partial}{\partial R} + \frac{M}{R} + 2\gamma_2 R \right) U_N(R) = 0 \quad (3.23)$$

avec $k^2 = -M\gamma_2 - \frac{g^* \mu_B B}{R^*} + \epsilon_R$, $q^2 = -(M+1)\gamma_2 + \frac{g^* \mu_B B}{R^*} + \epsilon_R$, $\epsilon_R = \frac{E_{CM}}{R^*}$ et $\alpha = \frac{\alpha_R}{R^* a^*}$.

Pour résoudre les équations (3.22 et 3.23), nous considérons les formes suivantes pour les fonctions du CM, qui sont des combinaisons linéaires de fonctions de Bessel :

$$\begin{cases} U_N(R) = AJ_M(kR) + BJ_M(qR) \\ V_N(R) = AJ_{M+1}(kR) + BJ_{M+1}(qR) \end{cases} \quad (3.24)$$

Dans ce qui suit, nous considérons uniquement l'état fondamental du mouvement du CM qui correspond à $N = 1$ et $M = 0$. Les valeurs propres de l'énergie E_{CM} sont donc déterminées par une résolution numérique des équations différentielles

$$\mathcal{H}_{CM} \Psi_N(R, \Phi) = E_{CM} \Psi_N(R, \Phi).$$

3.3 Résultats et discussions

Le calcul numérique de notre formalisme s'applique essentiellement aux *GaN* QD . *GaN* est un composé du groupe (III-V). Contrairement à la majorité des semi-conducteurs (III-V), *GaN* possède un caractère polaire important avec une constante de couplage ($\alpha_{LO} = 0.439$)[79] qui implique l'existence d'une forte interaction entre

les porteurs de charge et les phonons. Afin d'analyser l'effet de la force du couplage *electron-phonon*, nous appliquons également notre modèle à un autre composé (III-V) (*InAs*) caractérisé par un faible couplage *electron-phonon* ($\alpha_{LO} = 0.055$)[80] qui explique sa faible polarité. Nous soulignons que pour la plupart des composés (III-V), la constante de couplage *electron-phonon* est inférieure à 1, ce qui justifie la théorie des perturbations de Fröhlich.

Nous avons utilisé deux échelles de longueur pour caractériser la force relative du confinement et de l'interaction spin-orbite : $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_0}}$, $l_s = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e^* \alpha_R}}$, où l_0 est la longueur caractéristique correspondant au potentiel de confinement et l_s est la longueur associée à l'interaction spin-orbite. Tous les paramètres physiques utilisés dans cette étude sont listés dans le tableau 3.1 [79–86].

TABLE 3.1 – Paramètres des matériaux *GaN* et *InAs* utilisés dans les calculs.

<i>Material</i>	$\frac{m_e^*}{m_0}$	$\frac{m_h^*}{m_0}$	$E_g(eV)$	ϵ_0	ϵ_∞	$a^*(nm)$	$R^*(meV)$	$\hbar\omega_{LO}(meV)$	$\hbar\omega_{TO}(meV)$	α_{LO}	$\alpha_R(10^{-11}meV \times m)$
GaN	0.20	1.25	3.39	9.5	5.35	5.59	13.56	91.2	69.43	0.439	2
InAs	0.023	0.33	0.42	15.2	12.3	70	0.68	19	30.1	0.055	(1-5)

Dans ce travail, nous nous concentrons sur deux valeurs limites de la force de confinement : $l_0 = 5nm$ ($\hbar\omega_0 = 16.9meV$) et $l_0 = 10nm$ ($\hbar\omega_0 = 4.2meV$). Le premier cas correspond à un confinement fort avec $l_0 \preceq a^*$ (a^* est le rayon de Bohr donné dans le tableau 3.1) et le second cas correspond à un confinement faible avec $l_0 \succ a^*$.

3.3.1 propriétés magnétiques

La susceptibilité magnétique est un paramètre important qui définit le degré d'aimantation du système. Elle définit également la nature de la propriété magnétique, à savoir le diamagnétisme ou le paramagnétisme, et permet aussi d'étudier si la conversion du diamagnétique au paramagnétique est possible en présence d'un champ magnétique, ou s'il existe des paramètres qui peuvent contrôler cette transition.

Dans la figure 3.1, nous avons présenté la susceptibilité (χ) de *GaN* en fonction de l'intensité du champ magnétique donnée par le rapport ω_c/ω_0 pour un potentiel

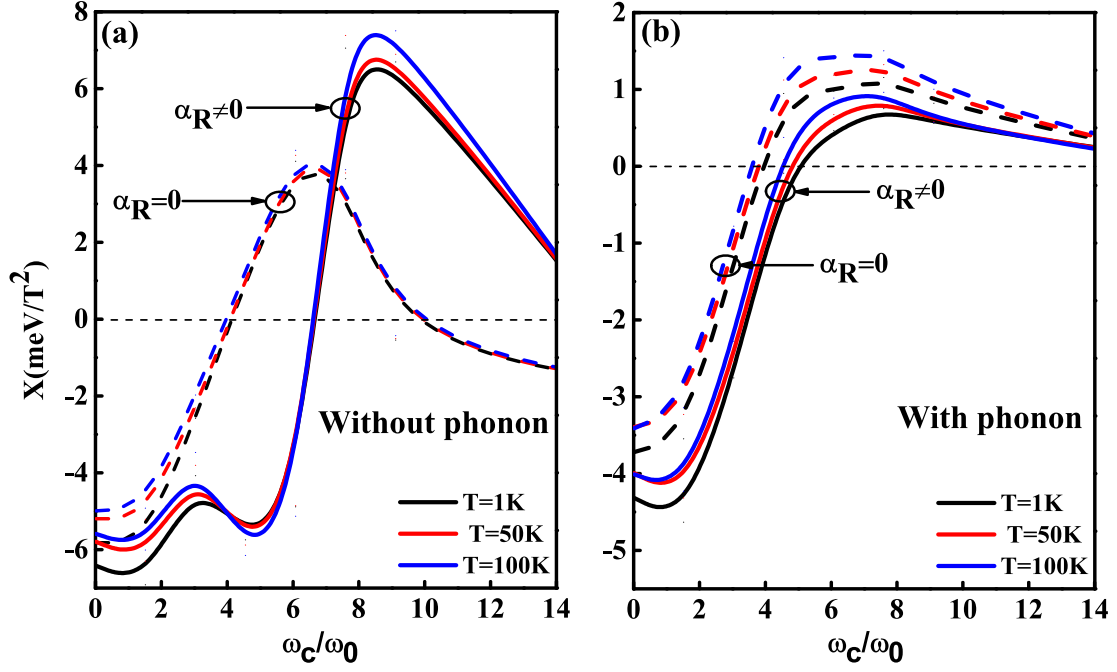


FIGURE 3.1 – Tracé de la susceptibilité de GaN en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10nm$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$) pour trois valeurs de température $T = 1K, T = 50K$ and $T = 100K$. Les lignes continues et les lignes en pointillé représentent respectivement le cas avec et sans RSOI ($\alpha_R \neq 0$ et $\alpha_R = 0$).

de confinement parabolique fixe $\hbar\omega_0 = 4.2meV$ correspondant à $l_0 = 10nm$ et pour trois valeurs de température ($T = 1, T = 50$ et $T = 100K$). Les lignes continues et les lignes en pointillé représentent respectivement le cas avec et sans RSOI ($\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (eV.m)$ et $\alpha_R = 0$). Il est intéressant de noter que même à $B = 0T$, le système présente un comportement diamagnétique ($\chi < 0$) pour toutes températures considérées et pour les deux cas avec et sans *electron-phonon* interaction (fig. 3.1(a) et fig. 3.1(b) respectivement). Dans les deux cas ($V_{e-ph} = 0$ et $V_{e-ph} \neq 0$), Dans les deux cas, nous pouvons remarquer qu'avec une augmentation du champ magnétique, la susceptibilité devient plus importante et le système prend un comportement paramagnétique ($\chi > 0$) à un champ magnétique modéré ($\omega_c/\omega_0 = 4$ ou $B \simeq 26T$) lorsque le RSOI est négligé et à ($\omega_c/\omega_0 = 7$ ou $B \simeq 46T$) lorsque le RSOI est pris en considération. Contrairement au cas, $V_{e-ph} = 0$, le cas $V_{e-ph} \neq 0$ présenté dans la fig. 3.1(b) montre un comportement remarquable : Après un maximum, la susceptibilité diminue très lentement et tend vers un régime de saturation. Le GaN QD montre un caractère paramagnétique même à des valeurs de champ magnétique plus élevées. Ceci est très

intéressant, montrant que la nature magnétique des *GaN* QD peut être manipulée très fortement avec le couplage *electron*-phonon.

L'introduction de l'interaction spin-orbite, le champ magnétique de coupure B_c (où la nature magnétique de la boîte passe de diamagnétique à paramagnétique) se déplace vers le champ magnétique supérieur ($\frac{\omega_c}{\omega_0} \simeq 7$ or $B \simeq 46T$). Nous notons que dans le cas où le RSOI est non négligeable ($\alpha_R \neq 0$) et sans tenir compte du couplage *electron*-phonon la susceptibilité présente deux pics, le premier est situé à un champ magnétique faible ($\frac{\omega_c}{\omega_0} \simeq 3$) et le second est observé à un champ magnétique élevé ($\frac{\omega_c}{\omega_0} \simeq 8.5$). Ces deux pics donnent approximativement les valeurs du rapport ω_c/ω_0 pour lesquelles les deux phases diamagnétique et paramagnétique sont maximales. Ce phénomène disparaît lorsque le couplage *electron*-phonon n'est pas négligé, comme le montre la fig. 3.1b.

Le paramètre d'aimantation M est donné par l'éq 2.40 est la capacité de l'échantillon à garder le magnétisme induit en présence du champ magnétique. Les résultats sont présentés pour $\alpha_R \neq 0$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m)) ainsi qu'en tenant compte du couplage *electron*-phonon.

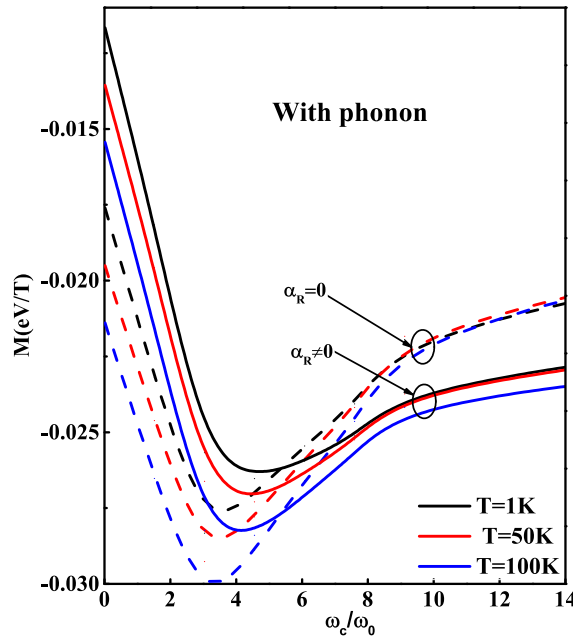


FIGURE 3.2 – Tracé de la magnétisation de *GaN* en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10nm$ et $\hbar\omega_0 = 4.2meV$) pour trois valeurs de température $T = 1K, T = 50K$ and $T = 100K$. Les lignes continues et les lignes en pointillé représentent respectivement le cas avec et sans RSOI ($\alpha_R \neq 0$ et $\alpha_R = 0$).

La fig. 3.2 montre la variation de l'aimantation en fonction du rapport $\frac{\omega_c}{\omega_0}$ en tenant compte des effets des phonons. En outre, afin d'analyser l'effet du SOI, nous avons présenté les deux cas avec et sans RSOI. Comme on peut le voir, il y a deux régions principales : la première région, $\frac{\omega_c}{\omega_0} \lesssim 4$ ou $B \lesssim 26T$ on constate que pour un B donné le système marque le renforcement de l'aimantation avec RSOI, alors que dans la seconde région $\frac{\omega_c}{\omega_0} \gtrsim 7$ or $B \gtrsim 46T$, l'aimantation est réduite avec RSOI.

Il est important de souligner une remarque importante : Le comportement général de l'aimantation avec ou sans RSOI montre que le paramètre M diminue vers un minimum puis change de variation et commence à augmenter jusqu'à une valeur limite présentant une saturation. Le minimum tend à se déplacer vers les faibles intensités du champ magnétique lorsque la température augmente. Selon la définition, la susceptibilité décrit la pente de l'aimantation $\chi = \frac{dM}{dB}$ dans le diagramme (M, B) , ainsi, comme le montre la fig. 3.2, avant le minimum, l'aimantation diminue ($\frac{dM}{dB} < 0$) ce qui signifie que le matériau a un caractère diamagnétique ($\chi < 0$), après ce minimum, l'aimantation augmente et admet une pente positive ($\frac{dM}{dB} > 0$) ce qui explique le caractère paramagnétique du système ($\chi > 0$).

Comme nous avons déjà indiqué, GaN admet une constante de couplage plus grande que $InAs$, $\alpha_{LO}^{GaN} = 0.439$ et $\alpha_{LO}^{InAs} = 0.055$. Afin d'analyser l'impact du couplage avec les phonons sur la susceptibilité magnétique, nous comparons sur la fig. 3.3 ce paramètre physique pour GaN et $InAs$. Sur cette figure, nous avons donc représenté la susceptibilité de $InAs$ (couleur rouge) et de GaN (couleur noire) pour les deux cas avec et sans *electron-phonon* interaction (fig. 3.3(a) et fig. 3.3(b) respectivement). Comme on peut le voir sur la fig. 3.3(a) la susceptibilité présente un pic dans les deux cas de GaN and $InAs$. Ces pics sont situés à $\omega_c/\omega_0 = 0.25$ ($B \approx 1T$) pour $InAs$ et $\omega_c/\omega_0 = 9$ ($B \approx 60T$) pour GaN . Nous remarquons également que les deux matériaux changent leur caractère de diamagnétique ($\chi < 0$) au paramagnétique ($\chi > 0$) comme l'indique la ligne rouge horizontale (ligne noire) pour $InAs$ (GaN). Ces changements de caractère diamagnétique apparaissent à $\omega_c/\omega_0 = 0.62$ ($B \approx 2.34T$) pour $InAs$ et $\omega_c/\omega_0 = 7$ ($B \approx 46T$) pour GaN . Avec l'augmentation du champ magnétique, les courbes chutent et les matériaux changent de caractère et rétablissent leur caractère diamagnétique. La fig. 3.3(b), représente le cas où l'interaction e-phonon est prise en compte. Tout d'abord, tous les pics sont moins prononcés, avec un décalage vers la droite pour $InAs$

et vers la gauche pour *GaN*. Nous notons également que le système passe de diamagnétique à paramagnétique mais atteint la limite de saturation en conservant un caractère paramagnétique.

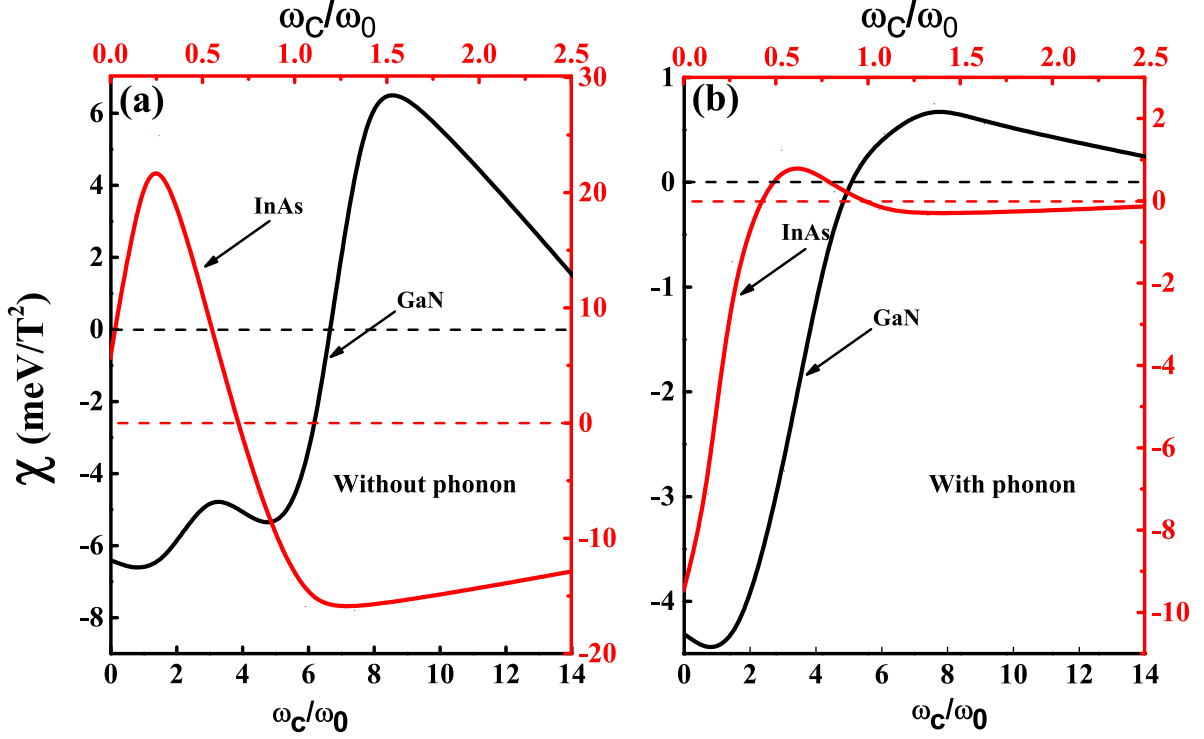


FIGURE 3.3 – susceptibilité de *GaN* et *InAs* QD en fonction de ω_c/ω_0 ($l_0 = 10\text{nm}$ et $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$,).

3.3.2 propriétés thermodynamiques

L'étude de l'énergie interne est importante car elle influence la fonction de partition, et nous pouvons donc déterminer les propriétés thermodynamiques du système en analysant le comportement de l'énergie et de la fonction de partition. La fig. 3.4(a) montre la variation de l'énergie interne pour *GaN* en fonction de la température pour deux forces de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ et $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$ et pour $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}(\text{eV.m})$. les lignes continues et les lignes en pointillés sont associées avec et sans effet polaron, respectivement dans toutes les figures. Nous observons qu'avec l'augmentation de la température, l'énergie interne du système augmente également. Ceci est dû au fait que l'énergie cinétique du système devient plus importante lorsque la température augmente (de $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ à $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$), l'énergie interne aug-

mente. Nos calculs montrent un résultat important qui nous permet de confirmer que les interactions phonon réduisent l'énergie totale du système, il est clair que le polaron affecte considérablement l'énergie interne. Fig. 3.4(b) affiche la variation de l'énergie

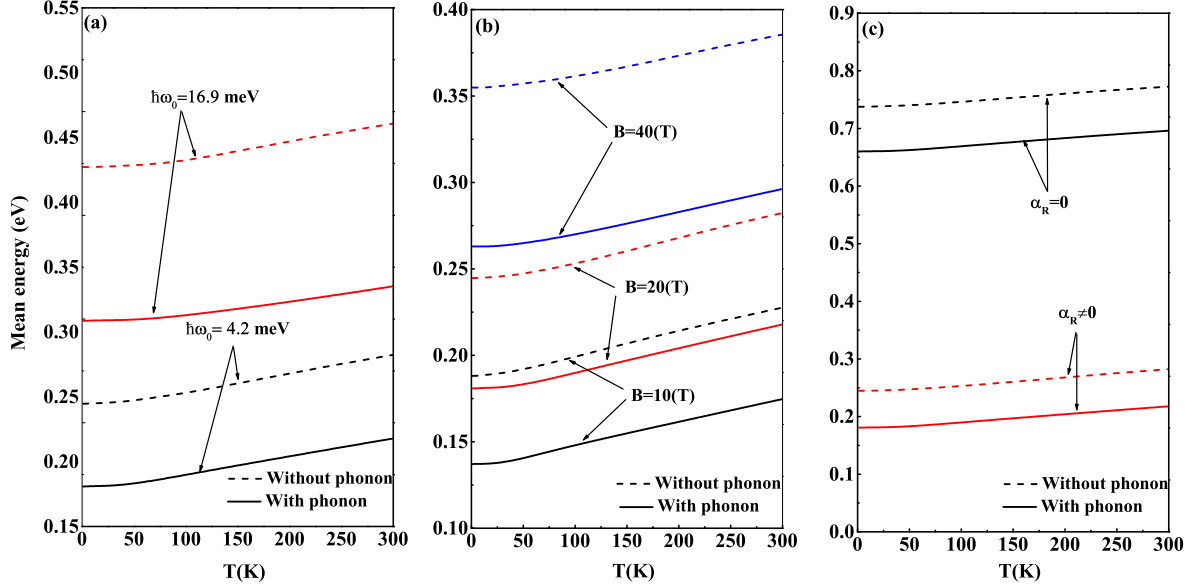


FIGURE 3.4 – Energie interne pour *GaN* en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ and $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$ à $B = 20\text{T}$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (\text{eV.m})$. (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40\text{T}$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (\text{eV.m})$. (c) sans et avec RSOI à $B = 20\text{T}$ et $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$.

interne en fonction de la température pour un champ magnétique $B = 10, 20$ et 40T et pour $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (\text{eV.m})$ et $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$. Avec l'augmentation de l'intensité du champ magnétique, l'énergie interne du système augmente également. La prise en compte de l'effet polaron se traduit par une diminution d'environ $0,05\text{eV}$ de l'énergie interne. Similairement, pour comprendre le comportement de l'énergie interne avec le RSOI, nous avons tracé la fig. 3.4(c), qui montre la variation de l'énergie interne en fonction de la température avec et sans RSOI. La présence de RSOI diminue l'énergie moyenne du système d'environ $0,5\text{meV}$.

La variation de la capacité thermique en fonction de la température (en K) pour deux forces de confinement ($\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ et $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$) à $B = 20\text{T}$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (\text{eV.m})$ est illustré à la fig. 3.5(a), où les lignes continues et les lignes en pointillés sont associées avec et sans effet polaron, respectivement. Nous pou-

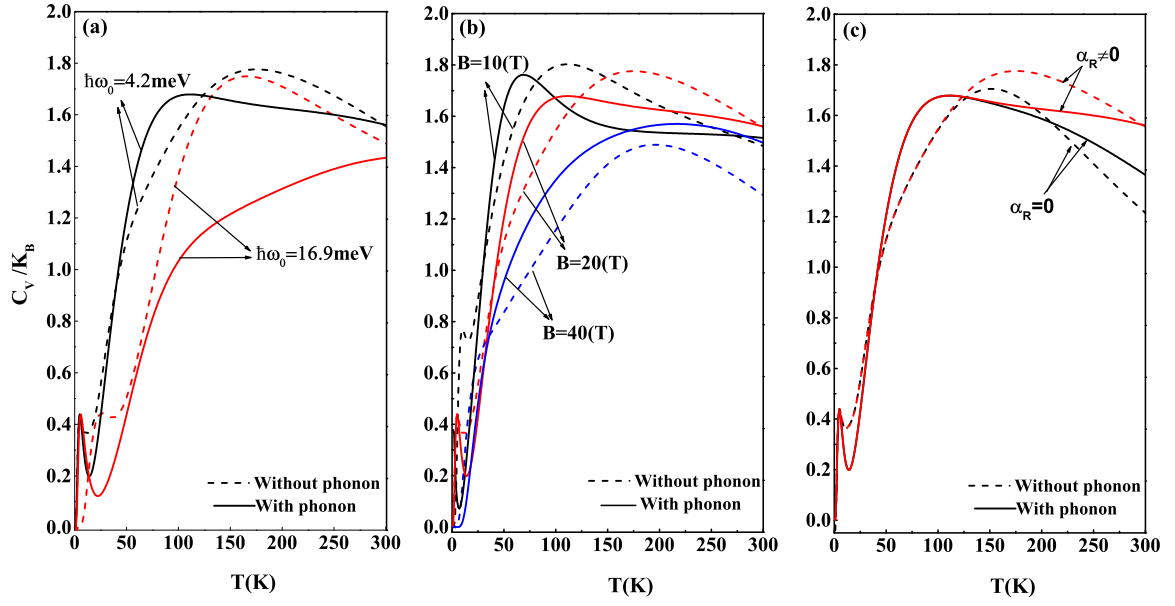


FIGURE 3.5 – Capacité thermique pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ and $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m). (c) sans et avec RSOI à $B = 20T$ et $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$.

vons remarquer que jusqu'à $20K$, la capacité thermique avec l'effet polaron a le même comportement pour les deux forces de confinement ($\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ et $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$), cependant sans effet polaron, avec une augmentation de la force de confinement (de $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ à $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$), le comportement de la capacité thermique pour les deux forces de confinement sont opposées l'une à l'autre. A partir d'une température de $25K$, la capacité thermique pour $\hbar\omega_0=16.9\text{meV}$ augmente avec une augmentation de la température et tend à saturer vers $300K$. Il est intéressant de noter que pour une force de confinement de 16.9meV la capacité thermique sans effet polaron est plus importante que celle avec effet polaron alors que pour une force de confinement de 4.2meV avant $100K$ la capacité thermique avec effet polaron est plus importante et après cela la capacité thermique sans effet polaron est dominante.

La fig. 3.2(b) montre la variation de la capacité thermique de GaN en fonction de la température pour différents valeurs du champ magnétique $B = 10, 20$ et $40T$ pour $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m). Nous observons un pic dans la courbe de capacité thermique à une température particulièrement basse, et après cette valeur

de température, la capacité thermique diminue. Avec l'augmentation de l'intensité du champ magnétique, les courbes de capacité thermique se déplacent vers les hautes températures avec une diminution de la hauteur du pic. Avec l'effet polaron, la capacité thermique est dominante en dessous de $75K$ pour un champ magnétique de $10T$, alors que pour un champ magnétique de $20T$, elle est dominante en dessous de $125K$ mais pour $40T$, la capacité thermique avec l'effet polaron est dominante au-dessus de $50K$.

Le terme de Rashba affecte la capacité thermique pour une température supérieure à $100K$ comme le montre la fig. 3.5(c). La présence de l'effet polaron déplace la courbe de capacité thermique vers des températures plus basses. Il est intéressant de mentionner ainsi que les pics obtenus à basse température correspondent à l'anomalie de Schottky. [23, 87].

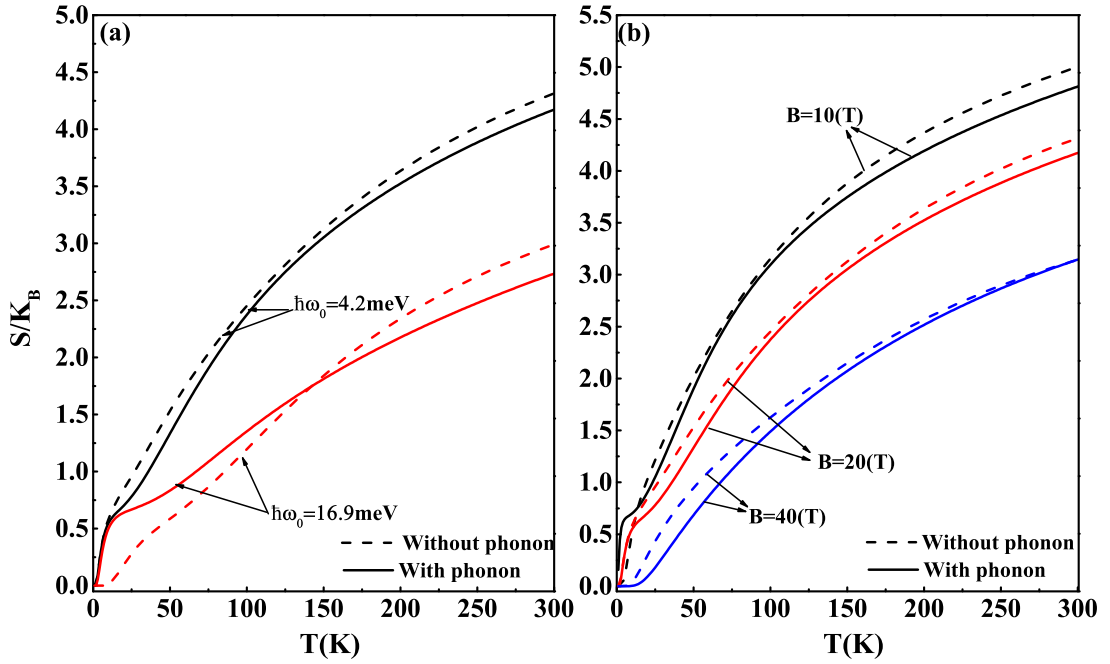


FIGURE 3.6 – Entropie pour GaN en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2 \text{ meV}$ and $\hbar\omega_0 = 16.9 \text{ meV}$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} \text{ (eV.m)}$. (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2 \text{ meV}$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} \text{ (eV.m)}$.

L'entropie explique le désordre du système. La fig. 3.6(a) présente la variation de l'entropie en fonction de la température avec deux forces de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2 \text{ meV}$ et $\hbar\omega_0 = 16.9 \text{ meV}$. Les lignes continues et les lignes en pointillés sont associées avec et sans effet polaron, respectivement avec $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} \text{ (eV.m)}$.

L'entropie du système croît avec l'augmentation de la température, car celle-ci accroît le caractère aléatoire du système en augmentant l'énergie. Avec une diminution de la force de confinement, l'entropie augmente. La présence de l'effet polaron entraîne une diminution de l'entropie lorsque la force de confinement est faible ($\hbar\omega_0 = 4.2meV$) alors que lorsque la force de confinement est importante ($\hbar\omega_0 = 16.9meV$), l'entropie est plus importante à basse température (moins de 150K) qu'à haute température (plus de 150K).

La figure 3.6(b) représente l'entropie en fonction de la température pour différentes intensités de champ magnétique à $\hbar\omega_0=4.2meV$ and $\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (eV.m)$. Comme on peut le voir, avec une augmentation de l'intensité du champ magnétique, l'entropie diminue, et la prise en compte de l'effet polaron la fait encore diminuer. Les lignes continues correspondent aux courbes en tenant compte de l'effet polaron et les lignes pointillées aux courbes sans tenir compte de l'effet polaron.

L'énergie libre de Helmholtz nous renseigne sur le travail utile fourni par un système ou nous pouvons la définir comme l'énergie nécessaire pour créer un système à température et volume constants, ce qui nous permet de déterminer le critère de stabilité. La fig. 3.7 donne la variation de l'énergie libre de Helmholtz de *GaN* en fonction de la température avec effet polaron (lignes continues) et sans effet polaron (lignes pointillées). Toutes les courbes présentées dans la fig. 3.7 montrent une diminution de l'énergie libre de Helmholtz avec une augmentation de la température, car l'augmentation de la température entraîne une augmentation de l'entropie et donc une diminution de l'énergie libre de Helmholtz. La Fig. 3.7(a) présente cette variation en tenant compte du RSOI. Nos résultats montrent que l'énergie libre de Helmholtz dépend fortement du RSOI. Le décalage est très important et peut atteindre environ (0.5eV) pour les deux cas avec et sans phonon. A partir de cette observation importante, il est recommandé de ne pas négliger le RSOI. En introduisant cet effet dans nos calculs avec ($\alpha_R = 2 \times 10^{-11} (eV.m)$), nous avons présenté dans la Fig. 3.7(b) la variation de l'énergie libre de Helmholtz en fonction de la température pour deux forces de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2$ et $\hbar\omega_0 = 16.9meV$ pour $B = 20T$. Comme nous pouvons le remarquer, l'énergie libre de Helmholtz est plus importante pour une force de confinement élevée. Ce comportement a déjà été rencontré par plusieurs auteurs [23]. Nous notons également que l'effet du polaron est plus important pour les cas de confinement fort. Le

décalage est d'environ 0,6 eV pour $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ et 0.12 eV pour $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$.

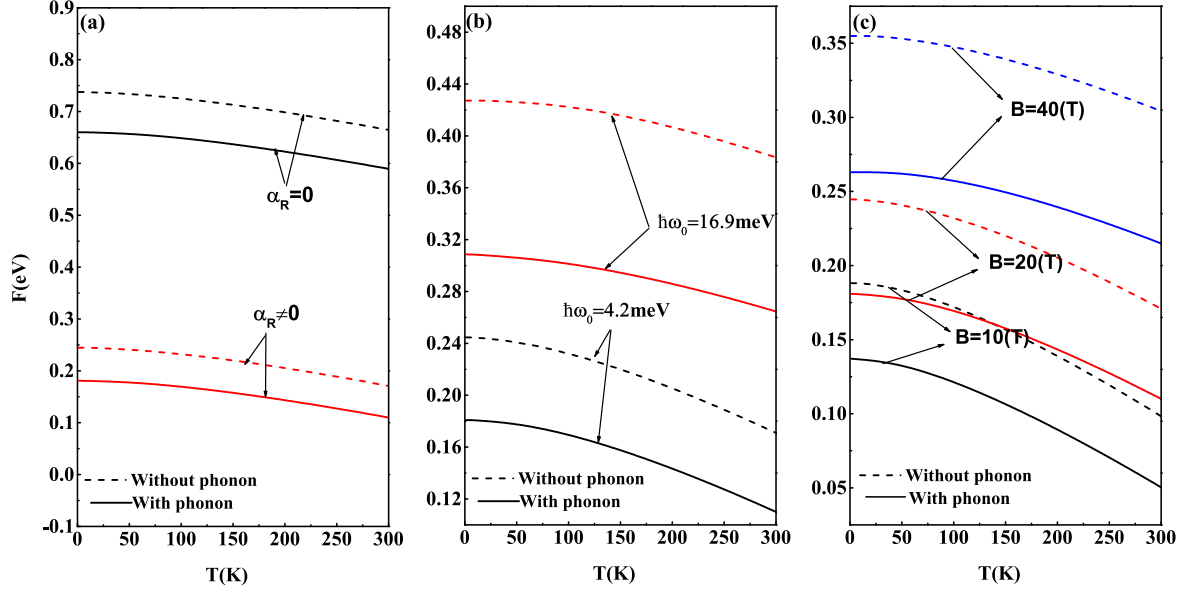


FIGURE 3.7 – Energie libre de Helmholtz pour *GaN* en fonction de la température, (a) pour deux valeurs de la force de confinement $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$ and $\hbar\omega_0 = 16.9\text{meV}$ à $B = 20T$ et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m). (b) pour trois valeurs de champ magnétique $B = 10, B = 20$ et $B = 40T$, avec $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$, et $\alpha_R = 2 \times 10^{-11}$ (eV.m). (c) sans et avec RSOI à $B = 20T$ et $\hbar\omega_0 = 4.2\text{meV}$.

Finalement, dans la Fig. 3.7(c), nous avons tracé la variation de l'énergie libre de Helmholtz en fonction de la température pour trois valeurs du champ magnétique ($B = 10, 20$ et $40T$). Comme on le sait, le champ magnétique agit comme un confinement additif conduisant à un déplacement des niveaux d'énergie, l'entropie du système diminue donc, ce qui entraîne une augmentation de l'énergie libre de Helmholtz. Nos calculs montrent que l'effet du phonon est plus important lorsque l'intensité du champ magnétique est plus élevée.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude détaillée sur l'effet de l'interaction spin-orbite et de l'interaction *électron*-phonon sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques des structures quantiques à 2D. Nos résultats démontrent en particulier que les propriétés thermodynamiques et magnétiques dépendent fortement du

champ magnétique, de l'interaction *électron*-phonon et du Rashba SOI. Il est intéressant de noter que même à $B = 0T$, la susceptibilité du système présente un comportement diamagnétique pour toutes températures, et avec une augmentation du champ magnétique, la susceptibilité augmente et le système présente un comportement paramagnétique pour les deux cas associés avec et sans effet polaronique. Cependant, avec l'introduction de l'interaction spin-orbite, le champ magnétique de coupure B_c (où la nature magnétique la boîte quantique passe de diamagnétique à paramagnétique) se déplace vers le champ magnétique le plus élevé. La présence de l'effet polaron et du RSOI entraîne une diminution de l'énergie interne du système. D'autre part les courbes de capacité thermique présentent un pic à basse température (anomalie de Schottky) et un déplacement vers les hautes températures avec une augmentation du confinement et de l'intensité du champ magnétique.

Effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques d'un système à trois électrons.

4.1	Introduction	60
4.2	Base théorique	62
4.3	Résultats et discussions	66
4.3.1	propriétés magnétiques	68
4.3.2	propriétés thermodynamiques	70
4.3.3	effets magnétocaloriques	74
4.4	Conclusion	77

4.1 Introduction

La manipulation du spin joue un rôle prépondérant dans l'étude des QDs dans des champs magnétiques externes pour les applications liées aux dispositifs. Les études sur les isolants topologiques et les fermions de Weyl sont liées aux effets de spin car elles sont utiles pour les analyses de l'effet Hall de spin, qui peuvent fournir un moyen de fabriquer des dispositifs spintroniques [88, 89]. Ces études se concentrent principalement

sur les interactions spin-orbite (SOI). Les deux principaux types d'interactions spin-orbite sont les interactions de Rashba et de Dresselhaus, qui ont la même force et les mêmes effets. Les SOI apportent des modifications importantes à diverses propriétés ; par exemple, l'ajout de SOI affecte de manière significative les propriétés magnétiques et thermodynamiques (chaleur spécifique, entropie, énergie libre d'Helmholtz, etc.) Récemment, nous avons étudié les effets des SOI sur les propriétés thermomagnétiques de deux électrons dans des systèmes bidimensionnels (2D) [38]. La plupart des études se sont focalisées sur un électron unique et deux électrons dans des QDs où le confinement est un potentiel de confinement parabolique ou semi-parabolique. Ces potentiels ont attiré l'attention pour deux raisons : la solution analytique pour la plupart des systèmes sous confinement parabolique est facilement disponible, et même pour un système à deux électrons, le centre de masse et les coordonnées relatives peuvent être facilement séparés, et le problème est réduit à une équation de mouvement relatif. [90, 91]. Le traitement mathématique devient plus difficile à mesure que le nombre d'électrons en interaction augmente. Seules quelques études ont été menées avec trois électrons [92–94].

Les systèmes avec un nombre contrôlé d'électrons dans les QDs attirent de plus en plus l'attention. Il a été démontré que le nombre d'électrons peut influencer le SOI et le RSOI, ce qui permet de réguler le spin dans les processus de magnéto-transport. Cette technique offre des possibilités intéressantes pour la production de dispositifs de spintronique. Les applications potentielles comprennent les systèmes de mémoire non volatile [9–13], l'informatique quantique [14], et d'autres dispositifs spintroniques. [15].

En général, les semi-conducteurs présentent des caractéristiques polaires ou ioniques influençant les propriétés physiques des électrons. Cette polarisation intrinsèque induit une interaction électron-longitude-optique (LO) phonon appelée polaron. Bien que ces interactions soient plus faibles que l'interaction coulombienne électron-électron, elles sont similaires à celles des SOI. L'importance de ces effets sur les propriétés électroniques des QDs en présence d'un champ magnétique a été largement étudiée.

Ce chapitre est organisé comme suit : La section I présente un modèle théorique détaillé, suivi de résultats détaillés et de discussions dans la section II. Enfin, une brève conclusion est illustrée pour les résultats obtenus.

4.2 Base théorique

Dans cette partie, nous présentons l'approche théorique pour déterminer l'énergie de trois électrons en interaction confinés dans une boîte quantique avec un champ magnétique perpendiculaire appliqué $\vec{B} = (0, 0, B)$, qui est décrit dans la jauge symétrique par $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$. En tenant compte de l'effet du RSOI et des interactions électron-LO-phonon, l'énergie des trois polarons corrélés est une solution de l'équation de Schrödinger $\hat{H}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle$. Dans l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien est exprimé comme suit

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + V_c + \hat{H}_R^{SO} + \hat{H}_z + \hat{H}_{pol}, \quad (4.1)$$

Le premier terme représente l'Hamiltonien des trois électrons en interaction dans une boîte quantique. Dans cette étude, nous supposons que le confinement est décrit par un potentiel parabolique $\hat{H}_{el}$ donné par

$$\hat{H}_{el} = \frac{1}{2m_e^*} \sum_{j=1}^3 \left(\vec{p}_j + \frac{e\vec{A}_j}{c} \right)^2 + \frac{1}{2}m_e^*\omega_0^2 \sum_{j=1, i<j}^3 |\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2, \quad (4.2)$$

Le deuxième terme de l'éq. (4.1) représente l'interaction électron-électron, qui est définie comme suit

$$V_c = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^{j-1} \frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\vec{r}_j - \vec{r}_i|}, \quad (4.3)$$

Le Hamiltonien Rashba spin-orbite est donné par le troisième terme de l'éq. (4.1), qui s'exprime sous la forme suivante :

$$\hat{H}_R^{SO} = \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \left[\hat{\sigma}_j \times \left(\hat{p}_j + \frac{e\hat{A}_j}{c} \right) \right] = \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{i=1}^3 \left[\hat{\sigma}_{x,i} \left(\hat{p}_{y,i} + \frac{e\hat{A}_{y,i}}{c} \right) - \hat{\sigma}_{y,i} \left(\hat{p}_{x,i} + \frac{e\hat{A}_{x,i}}{c} \right) \right], \quad (4.4)$$

où α_R représente la constante de couplage de Rashba

Dans l'éq. (4.1), le quatrième terme représente l'effet Zeeman

$$\hat{H}_z = \frac{1}{2}g^*B\mu_B \sum_{j=1}^3 \hat{\sigma}_{z,j}, \quad (4.5)$$

où $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ désigne le magnéton de Bohr, et g^* est le facteur de Landé de l'électron.

Le dernier terme de l'éq. (4.1) est l'opérateur cinétique du phonon et du couplage électron-LO-phonon, qui est décrit dans le cadre de l'approche de Fröhlich [95]. Cette

approche est expliquée à l'aide d'une image simple. En effet, dans un semi-conducteur polaire, lorsqu'un électron de la bande de conduction se déplace dans un matériau caractérisé par son champ de Coulomb, il se produit autour de lui une polarisation ionique qui influence le mouvement électronique. Dans ces conditions, la particule doit acquérir une polarisation au cours de son mouvement. Cette quasiparticule, formée d'un électron et de la charge de polarisation induite, est appelée polaron. Dans l'approche de Fröhlich, les modes optiques ont la même fréquence. Le diélectrique est traité comme un milieu continu et les électrons se déplacent avec une dispersion quadratique. En utilisant cette approche, les derniers termes de l'éq. (4.1) peuvent être exprimés comme suit

$$\hat{\mathcal{H}}_{pol} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} \hat{a}_{\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^3 \left[\hat{a}_{\vec{q}} V_{\vec{q}} (\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j) + H.c) \right]. \quad (4.6)$$

ici, ω_{LO} représente la fréquence des phonons, $\hat{a}_{\vec{q}}^+$ ($\hat{a}_{\vec{q}}$) l'opérateur de création (annihilation) des phonons avec un vecteur d'onde $\vec{q} = (\vec{q}_{\parallel}, \vec{q}_z)$ dans la branche optique, et $V_{\vec{q}}$ est le coefficient de couplage électron-LO-phonon, qui est donné par la formule suivante [95] :

$$V_{\vec{q}} = \left[\frac{2\pi e^2}{V} \frac{\hbar\omega_{LO}}{q^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \right]^{1/2}, \quad (4.7)$$

où V est le volume du cristal.

Rappelons que dans les semi-conducteurs (*III – IV*) caractérisés par un faible couplage électron-phonon, les interactions avec les phonons peuvent être considérées à travers une masse polaronique dépendant du couplage électron-LO-phonon α_{LO} . Selon l'approximation de Feynman pour un faible couplage électron-LO-phonon [96],

$$m_p^* = m_e^* (1 + \frac{\alpha_{LO}}{6}). \quad (4.8)$$

avec

$$\alpha_{LO} = \frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{2m_e^*\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right). \quad (4.9)$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger $\hat{\mathcal{H}}|\nu\rangle = E_{\nu}|\nu\rangle$, nous introduisons initialement les coordonnées de Jacobi définies comme suit [97] :

$$\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3}{3}, \quad \vec{\rho} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \vec{\lambda} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2 - 2\vec{r}_3}{\sqrt{6}} \quad \text{pour les coordonnées et}$$

$$m_e^* = m_{\rho}^* = m_{\lambda}^* \quad \text{et} \quad M_e = 3m_e^* \quad \text{pour les masses.}$$

Par conséquent, l'Hamiltonien de l'éq. (4.1) devient

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_c + \hat{\mathcal{H}}_{pol}. \quad (4.10)$$

Les trois parties de l'Hamiltonien précédent sont l'Hamiltonien du système à trois électrons sans interaction obtenu après la séparation de mouvement, le potentiel Coulombien et l'Hamiltonien représentant le couplage électron-LO-phonon, respectivement. Ces termes sont définis comme suit :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 = & \frac{p_\rho^2}{2m_\rho^*} + \frac{p_\lambda^2}{2m_\lambda^*} + \frac{1}{2}m_e^*\Omega^2(\rho^2 + \lambda^2) + \frac{P_R^2}{2M_e} + \frac{1}{8}M_e\omega_c^2 R^2 + \frac{1}{2}\omega_c \sum_{j=1}^3 L_z^{(j)} \\ & + \frac{\alpha_R}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{21} & 0 \end{pmatrix} + \frac{3}{2}g^*\mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$V_c = \frac{e^2\eta}{\varepsilon_\infty\sqrt{\rho^2 + \lambda^2}}, \quad (4.12)$$

où $\Omega^2 = \frac{\omega_c^2}{4} + 3\omega_0^2$ avec $\omega_c = \frac{eB}{m_e^*}$ représente la fréquence de Larmor, $L_z = m\hbar(m'\hbar)$ désigne la composante du moment angulaire dans la partie du centre de masse (CM) (partie relative), m et m' représentent les nombres quantiques du moment angulaire de la partie de CM et de la partie relative, respectivement, et $\eta = \left[\frac{\sqrt{1+\alpha^2}}{\alpha\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{2(1+\alpha^2)}}{\sqrt{3+\alpha}} + \frac{\sqrt{2(1+\alpha^2)}}{\sqrt{3-\alpha}} \right]$. avec, $\alpha = \frac{\rho}{\lambda}$.

$\mathcal{H}_{12}$, et $\mathcal{H}_{21}$ sont les expressions obtenues par le développement des éléments de matrice du terme de Rashba

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{12} = \hbar \left[\frac{\partial}{\partial R_x} - i \frac{\partial}{\partial R_y} \right] + eB(R_x - iR_y) \\ \mathcal{H}_{21} = \hbar \left[-\frac{\partial}{\partial R_x} - i \frac{\partial}{\partial R_y} \right] + eB(R_x + iR_y) \end{cases} \quad (4.13)$$

Dans les conditions décrites ci-dessus, l'Hamiltonien est séparé en deux parties indépendantes, i.e., $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{rel} + \hat{\mathcal{H}}_{CM}$, et l'énergie du système est exprimé par $E = E_{rel} + E_{CM}$. L'équation de Schödinger décrivant le mouvement relatif est définie comme suit (voir l'annexe) :

$$\frac{d^2 U_{n',m'}(\xi)}{d\xi^2} - \left[\beta^2 \xi^2 + \frac{2e^2\eta}{\varepsilon\hbar\omega_0\sqrt{\frac{\hbar}{m_p^*\omega_0}}\xi} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+2) + \frac{3}{4}}{\xi^2} \right] U_{n',m'}(\xi) = \left(\frac{m'\omega_c}{\omega_0} - \varepsilon_{n',m'} \right) U_{n',m'}(\xi) \quad (4.14)$$

où $\beta^2 = 3 + \frac{\omega_c^2}{4\omega_0^2}$, $\xi^2 = \frac{m_p^*\omega_0}{\hbar}(\rho^2 + \lambda^2)$, $\varepsilon_{n',m'} = \frac{2E_{rel}}{\hbar\omega_0}$ et n' , $\tilde{\ell}$, et m' sont trois nombres quantiques.

L'éq.(4.14) ci-dessus est résolue à l'aide d'une méthode décrite dans l'annexe [92, 98, 99].

L'énergie de mouvement relative du système, qui est exprimée en unités de $\frac{\hbar\omega_0}{2}$, est

$$\varepsilon_{n',m'} = 2 \left(n' + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{1}{2} \frac{d^2 V_{eff}(\xi)}{d\xi^2} /_{\xi=\xi_0} + V_{eff}(\xi) /_{\xi=\xi_0}} + \frac{m'\omega_c}{\omega_0}, \quad (4.15)$$

ici, $V_{eff}(\xi) = \beta^2 \xi^2 + \frac{2R'_W}{\xi} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+2)+\frac{3}{4}}{\xi^2}$, avec $R'_W = \frac{e^2 \eta}{\epsilon \hbar \omega_0 l_0}$ étant le paramètre de Wigner, qui représente la force relative de la répulsion coulombienne entre deux électrons séparés par une distance de $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_0}}$.

Pour le mouvement du centre de la masse, l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'exprime de la manière suivante

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2M_e} \left[\frac{\partial^2}{\partial R_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial R_y^2} \right] \Psi_n(R, \Phi) + \frac{1}{2} M_e \Omega^2 R^2 \Psi_n(R, \Phi) + \frac{1}{2} \omega_c L_Z \Psi_n(R, \Phi) \\ & + \frac{\alpha_R}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} \Psi_n(R, \Phi) + \frac{3}{2} g^* \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Psi_n(R, \Phi) = E_{CM} \Psi_n(R, \Phi) \end{aligned} \quad (4.16)$$

En choisissant $R_x = R \cos \Phi$, $R_y = R \sin \Phi$, $R^2 = R_x^2 + R_y^2$, et $\Phi = \arctan\left(\frac{R_y}{R_x}\right)$, les expressions suivantes pour $\mathcal{H}_{12}$ et $\mathcal{H}_{21}$ donnée dans l'éq. (4.13) peut être obtenue :

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{12} = \hbar e^{-i\Phi} \left[\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \Phi} + \frac{eBR}{c} \right] \\ \mathcal{H}_{21} = \hbar e^{+i\Phi} \left[-\frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{R} \frac{\partial}{\partial \Phi} + \frac{eBR}{c} \right] \end{cases} \quad (4.17)$$

En considérant une fonction d'onde comme le produit du terme angulaire et radial indépendants :

$$\Psi_{n,m}(R, \Phi) = \begin{cases} U_n(R) e^{im\Phi} \\ V_n(R) e^{i(m+1)\Phi} \end{cases} \quad (4.18)$$

Dans ces conditions, l'Hamiltonien prend la forme suivante [38] :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + k^2 - \frac{m^2}{R^2} - \frac{M_e \omega_c^2 R^2}{4\hbar^2} \right) U_n(R) - \frac{2\alpha M_e}{\hbar^2} \left(\frac{\partial}{\partial R} + \frac{m+1}{R} + \frac{RBe}{\hbar} \right) V_n(R) = 0 \\ & \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + q^2 - \frac{(m+1)^2}{R^2} - \frac{M_e \omega_c^2 R^2}{4\hbar^2} \right) V_n(R) - \frac{2\alpha M_e}{\hbar^2} \left(-\frac{\partial}{\partial R} + \frac{m}{R} + \frac{RBe}{\hbar} \right) U_n(R) = 0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

où n et m représentent les nombres quantiques principaux et magnétiques, respectivement, des différents états du CM, $k^2 = \frac{-M_e m \omega_c}{\hbar} - \frac{3M_e g^* \mu_B B}{\hbar^2} + \frac{2M_e}{\hbar^2} E_{CM}$, et $q^2 = \frac{-M_e (m+1) \omega_c}{\hbar} + \frac{3M_e g^* \mu_B B}{\hbar^2} + \frac{2M_e}{\hbar^2} E_{CM}$.

Pour résoudre les éqs. 4.19, nous utilisons les fonctions d'onde suivantes pour le CM, qui est exprimé comme une combinaison linéaire de fonctions de Bessel :

$$\begin{cases} U_n(R) = A J_m(kR) + B J_m(qR) \\ V_n(R) = A J_{m+1}(kR) + B J_{m+1}(qR) \end{cases} \quad (4.20)$$

Dans ce qui suit, nous considérons uniquement l'état fondamental du mouvement du CM qui correspond à $n = 1$ et $m = 0$. Les valeurs propres de l'énergie E_{CM} sont donc déterminées par une résolution numérique des équations différentielles ci-dessus.

4.3 Résultats et discussions

Le calcul numérique de notre formalisme s'applique essentiellement aux *GaAs* QD. Le tableau 4.1 présente tous les paramètres physiques utilisés dans cette étude, extraits des références [94, 100, 101].

L'approche mentionnée dans la section théorique précédente a été utilisée pour déterminer les niveaux d'énergie de la boîte quantique à trois électrons dans un champ magnétique appliqué avec le RSOI. Comme nous l'avons vu, l'énergie correspondant à un système à trois électrons est donnée par $E = E_{CM} + E_{rel}$, où l'expression E_{CM} inclut le terme RSOI.

TABLE 4.1 – Les paramètres de *GaAs* utilisés dans cette étude.

<i>Material</i>	$\frac{m_e^*}{m_0}$	$E_g(eV)$	ϵ_0	ϵ_∞	R'_W	$\hbar\omega_{LO}(meV)$	$\hbar\omega_{TO}(meV)$	$\alpha_R(meV \times nm)$
<i>GaAs</i>	0.067	1.42	12.53	10,90	(1–10)	36,7	33,29	(1–5.4)

A partir des calculs numériques effectués dans cette étude, qui sont présentés dans le tableau 4.2, la température (T_a) et le champ magnétique (B) influencent la saturation de la fonction canonique de partition Z_c . à $T_a = 100K$, Z_c est saturé à partir du 12^{ème} niveau pour $B = 15T$ et au 22^{ème} niveau pour $B = 10T$. En revanche, pour $B = 5T$, il atteint la saturation au 26^{ème} niveau. Cependant, la saturation a été atteinte vers la limite de plusieurs états pour $T_a = 300K$. Nous en déduisons que Z_c est saturé au niveau de 140^{ème}, 190^{ème}, et 198^{ème} pour $B = 15T$, $B = 10T$, et $B = 5T$, respectivement.

TABLE 4.2 – Fonction de partition pour différents champs magnétiques à $T_a = 100K$ et $T_a = 300K$.

$B(T)$	5	10	15
Z_c at $T_a = 100K$			
$N = 12$	3.840192736E-5	7.181002597E-6	7.537266032E-7
22	3.867508285E-5	7.211805687E-6	7.537266032E-7
26	3.867512407E-5	7.211805687E-6	7.537266032E-7
29	3.867512407E-5	7.211805687E-6	7.537266032E-7
Z_c at $T_a = 300K$			
$N = 140$	0.1528546460	8.265973191E-2	3.609030166E-2
190	0.1535412371	8.294744409E-2	3.609030166E-2
198	0.1535412379	8.294744409E-2	3.609030166E-2
200	0.1535412379	8.294744409E-2	3.609030166E-2

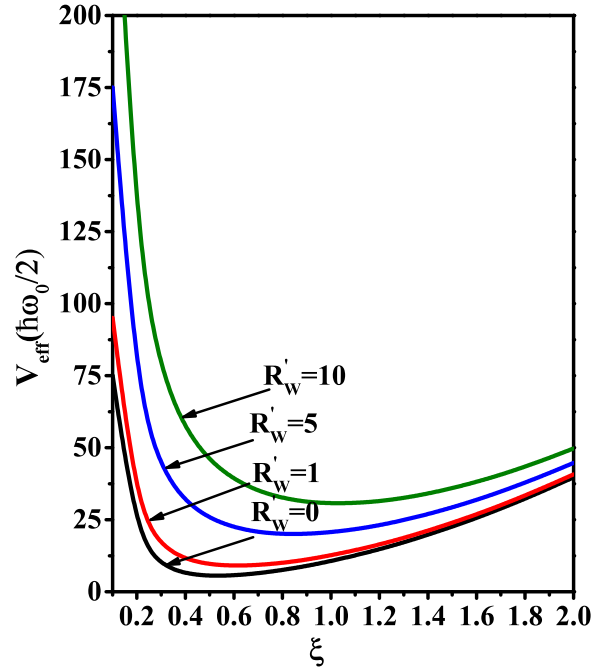


FIGURE 4.1 – Tracé du potentiel effectif en fonction de ξ pour différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W = 0, 1, 5$, et 10).

Sur la fig. 4.1, le potentiel effectif est représenté en fonction de ξ avec différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W = 0, 1, 5$, et 10). La figure illustre la dépendance du potentiel effectif par rapport au paramètre de Wigner. Avec l'augmentation du paramètre de Wigner, le potentiel effectif minimum se déplace vers des valeurs plus grandes de ξ . Cependant, le potentiel effectif converge vers presque la même valeur pour toutes les valeurs du paramètre de Wigner.

4.3.1 propriétés magnétiques

La fig. 4.2 représente la susceptibilité magnétique (χ) de *GaAs* QD en fonction de l'intensité du champ magnétique, qui est donnée par le rapport ω_c/ω_0 à $T_a = 1K$. Pour étudier l'effet de RSOI, les résultats de deux cas avec et sans RSOI ont été examinés. Il est bien connu que la susceptibilité est toujours négative si la RSOI est négligée (comme indiqué dans l'encadré de la fig. 4.2), et qu'elle est positive dans le cas où la RSOI est non nulle ($\alpha_R = 1, 2$, et $5.4meV \cdot nm$). Cela implique que le RSOI renforce la susceptibilité. Il est intéressant de noter qu'à $\omega_c/\omega_0 = 0$ ($B = 0T$), la figure montre un comportement diamagnétique ($\chi < 0$) pour chaque valeur du RSOI ($\alpha_R = 1, 2$, et $5.4meV \cdot nm$) dans les deux cas, i.e., avec et sans considération des interactions électron–LO–phonon.

En revanche, si l'on considère le cas où les interactions électron–LO–phonon sont non nulles, la susceptibilité est beaucoup plus élevée que dans le cas où ces interactions sont négligées. Dans les deux cas, la susceptibilité augmente avec le champ magnétique, et le système présente un comportement paramagnétique ($\chi > 0$) à une valeur intermédiaire du champ magnétique. En outre, on peut dire que la susceptibilité est saturée à $0(eV/T^2)$ pour des champs magnétiques intenses. Il est également observé que le RSOI déplace les courbes vers des champs magnétiques plus élevés.

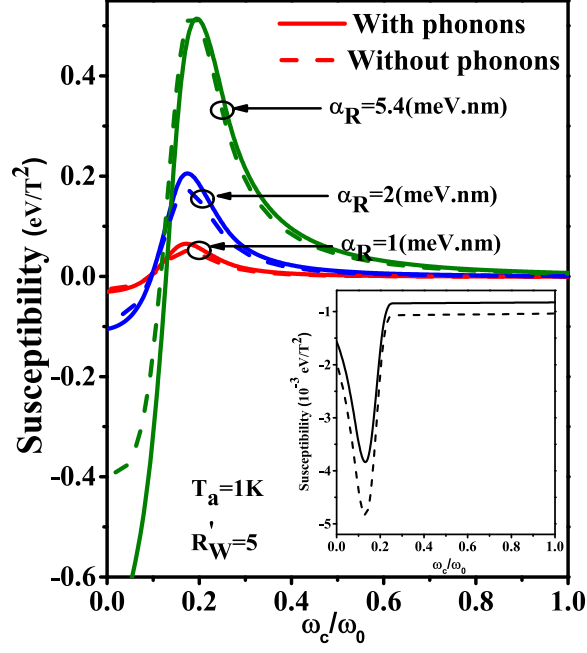


FIGURE 4.2 – Susceptibilité en fonction de ω_c/ω_0 pour quatre valeurs de RSOI, i.e., $\alpha_R = 0, 1, 2$, et $5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$, avec $R'_W = 5$.

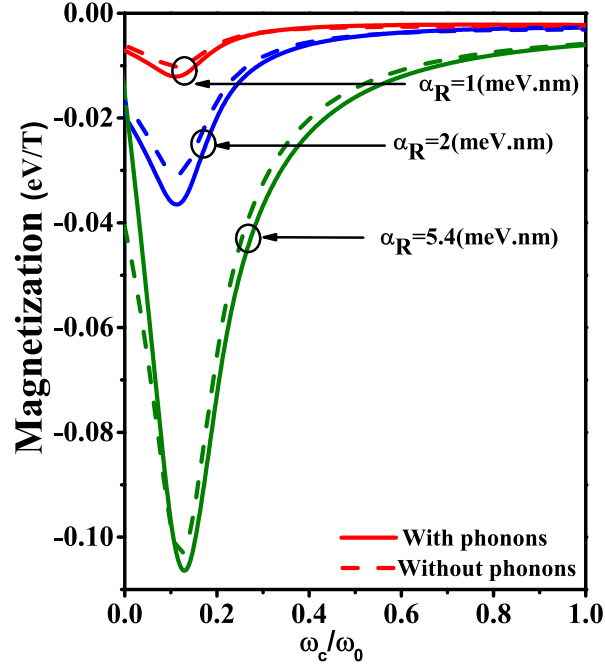


FIGURE 4.3 – Magnétisation for en fonction de ω_c/ω_0 pour trois valeurs de RSOI, i.e., $\alpha_R = 1, 2$, et $5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$, avec $R'_W = 5$.

La variation de l'aimantation M en fonction du rapport $\frac{\omega_c}{\omega_0}$ est représentée sur la fig. 4.3. Les lignes continues et pointillées correspondent respectivement aux cas avec et sans effet polaronique. Pour étudier l'effet du RSOI, on a étudié l'aimantation (M)

pour différentes valeurs de α_R ($\alpha_R = 1, 2$, et $5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$) à $R'_W = 5$ comme le montre la fig. 4.3a. Dans les deux cas, on distingue essentiellement deux régions : la première est située à $\frac{\omega_c}{\omega_0} \lesssim 0.1$ ($B \lesssim 0.19T$). Lorsque l'intensité du champ magnétique augmente, l'aimantation diminue. La deuxième région est située à $\frac{\omega_c}{\omega_0} \gtrsim 0.1$ ($B \gtrsim 0.19T$), dans laquelle l'aimantation augmente avec l'intensité du champ magnétique. Nous remarquons également que pour un B donné, le système montre un accroissement de l'aimantation avec une diminution de la valeur du RSOI.

Il est intéressant de souligner une remarque importante : Le comportement général de l'aimantation avec ou sans RSOI montre que le paramètre M diminue vers un minimum puis change de variation et commence à augmenter jusqu'à une valeur limite présentant une saturation. Selon la définition, la susceptibilité décrit la pente de l'aimantation $\chi = \frac{dM}{dB}$ dans le diagramme (M, B) , ainsi, comme le montre la fig. 4.3, avant le minimum, l'aimantation diminue ($\frac{dM}{dB} \prec 0$) ce qui signifie que le matériau a un caractère diamagnétique ($\chi \prec 0$), après ce minimum, l'aimantation augmente et admet une pente positive ($\frac{dM}{dB} \succ 0$) ce qui explique le caractère paramagnétique du système ($\chi \succ 0$).

4.3.2 propriétés thermodynamiques

En utilisant la fonction de partition Z_c en fonction de la température et de l'intensité du champ magnétique, les propriétés thermodynamiques de ce système sont discutées, en tenant compte du couplage spin-orbite de Rashba et du couplage électron-LO-phonon. La variation de l'énergie interne de GaAs QD en fonction de la température est représentée sur la fig. 4.4. Pour mieux comprendre l'effet de R'_W sur l'énergie interne, nous avons présenté la variation de l'énergie interne en fonction de la température pour différentes valeurs du paramètre de Wigner ($R'_W = 0, 1, 5$, et 10) dans deux cas avec et sans interaction électron-LO-phonon pour $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$ et $B = 0.5T$. Comme le montre la fig. 4.4(a). L'énergie interne augmente avec la valeur de l'interaction (de $R'_W = 0$ à $R'_W = 10$). On constate aussi que les interactions électron-LO-phonon diminuent l'énergie interne du système.

La variation de l'énergie interne en fonction de la température pour différentes intensités de champ magnétique ($B = 0.5, 5, 10$, et $15T$) à $R'_W = 5$ est représentée sur la fig. 4.4(b). Avec l'augmentation de l'intensité du champ magnétique, l'énergie interne

du système augmente. On observe également que le RSOI réduit l'énergie moyenne du système.

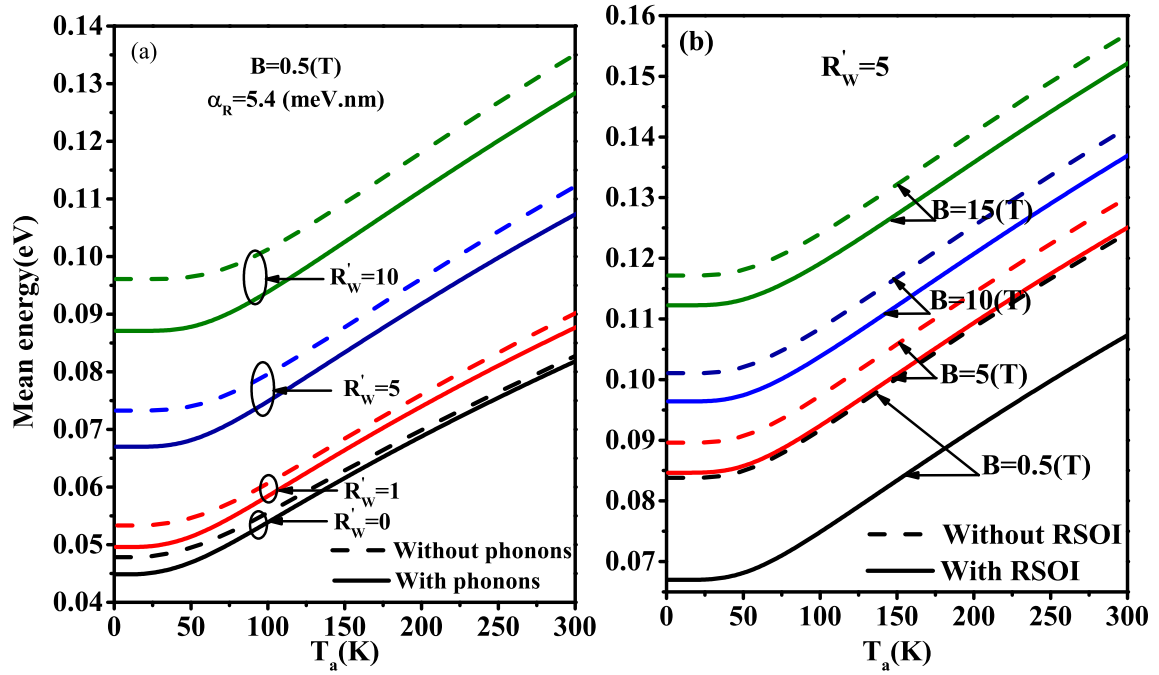


FIGURE 4.4 – Energie interne du *GaAs* QD en fonction de la température, (a) avec et sans phonons pour différentes valeurs du paramètre de Wigner (R'_W , 1, 5, et 10) avec $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$ et $B = 0.5T$. (b) avec et sans RSOI pour quatre valeurs du champ magnétique, i.e., $B = 0.5, 5, 10$, et $15T$, avec $R'_W = 5$.

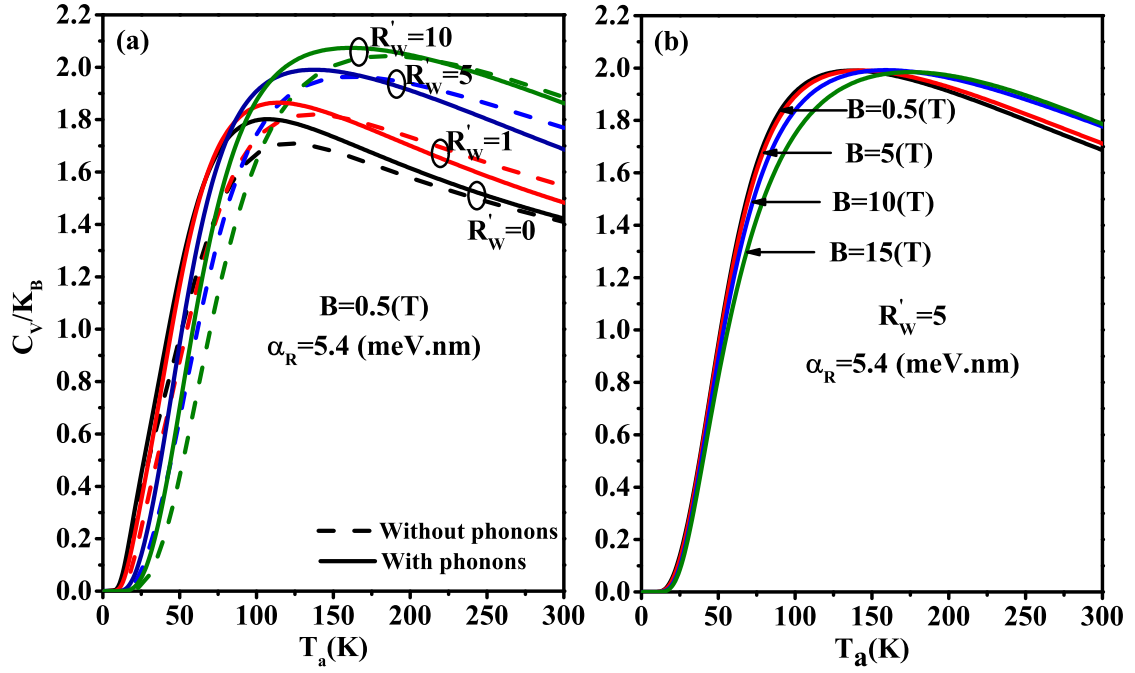


FIGURE 4.5 – Capacité thermique du *GaAs* QD en fonction de la température, (a) avec et sans phonons pour différentes valeurs du paramètre de Wigner (R'_W , 1, 5, et 10) avec $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$ et $B = 0.5T$. (b) avec et sans RSOI pour quatre valeurs du champ magnétique, i.e., $B = 0.5, 5, 10$, et $15T$, avec $R'_W = 5$.

La fig. 4.5(a) présente un tracé de la capacité calorifique C_V en fonction de la température, en tenant compte de l'effet du paramètre de Wigner pour $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$ et $B = 0.5T$. Comme le montre la figure, pour des températures élevées ($T_a \succ 125K$), la capacité thermique du QD est saturée et augmente de manière significative en augmentant la force d'interaction (de $R'_W = 0$ à $R'_W = 10$). À toutes températures, l'effet des interactions électron-LO-phonon sur la capacité calorifique est important. La fig. 4.5(b) représente la variation de la capacité thermique de GaAs QD en fonction de la température pour différentes intensités de champ magnétique $B = 0.5, 5, 10$, et $15T$ à $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$ et $R'_W = 5$. À basse température, une augmentation de l'intensité du champ magnétique réduit C_V ; cependant, à des températures plus élevées, le champ magnétique augmente la capacité calorifique.

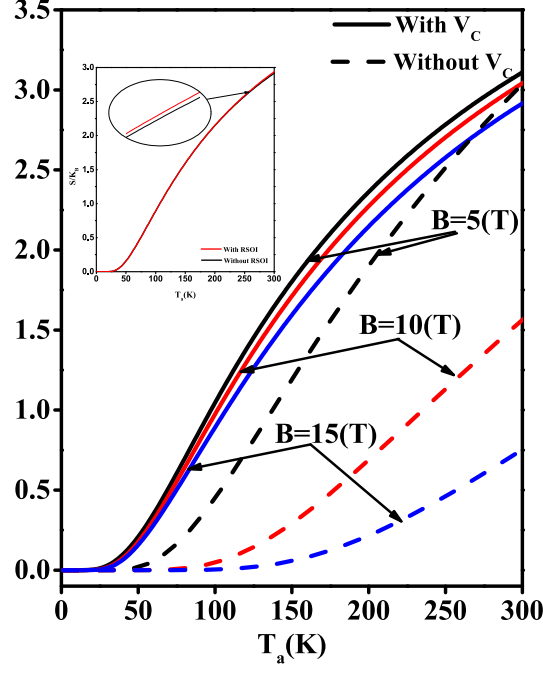


FIGURE 4.6 – Variation de l'entropie en fonction de la température de trois électrons en interaction (lignes continues) et d'électrons sans interaction (lignes pointillées) pour différentes valeurs de champ magnétique ($B = 5, 10$, et $15T$).

La variation de l'entropie (S) en fonction de la température est représentée sur la fig. 4.6. Cette fonction, qui décrit le désordre du système augmente avec la température car les probabilités d'occupation des niveaux changent et le désordre du système devient important sous l'effet de l'agitation thermique.

La fig. 4.6 montre la variation de l'entropie en fonction de la température de trois électrons en interaction (lignes continues) et d'électrons sans interaction (lignes pointillées) pour différentes valeurs de champ magnétique ($B = 5, 10$, et $15T$). La figure en encadré illustre l'effet de Rashba sur l'entropie (la ligne rouge correspond à $\alpha_R = 5.4 meV \cdot nm$, et la ligne noire correspond à $\alpha_R = 0 meV \cdot nm$). Nos résultats indiquent qu'à basse température, le champ magnétique a un faible effet sur l'entropie. En revanche, à haute température, lorsque le désordre du système devient important, l'application d'un champ magnétique peut aligner les spins des électrons, réduisant ainsi l'entropie.

Pour compléter notre discussion, nous avons analysé l'effet du RSOI sur l'entropie du système. La fig. 4.6 (voir l'encadré de la fig. 4.6) montre les variations de l'entropie dans les deux cas : avec et sans RSOI. L'entropie du système augmente lorsque le RSOI est plus important, et le même comportement a été observé par Malik et al.

[23]. Pour clarifier l'effet de l'interaction coulombienne sur la stabilité du système, nous avons examiné la variation de l'entropie en fonction de la température pour trois électrons en interaction et trois électrons sans interaction, comme le montre la fig. 4.6. Nous avons comparé les comportements pour trois valeurs différentes de champ magnétique ($B = 5, 10$, and $15T$) en tenant compte de RSOI. L'entropie des électrons qui n'interagissent pas est moins prononcée que celle du système qui interagit, ce qui implique que les interactions électrostatiques répulsives déstabilisent le système à trois électrons.

4.3.3 effets magnétocaloriques

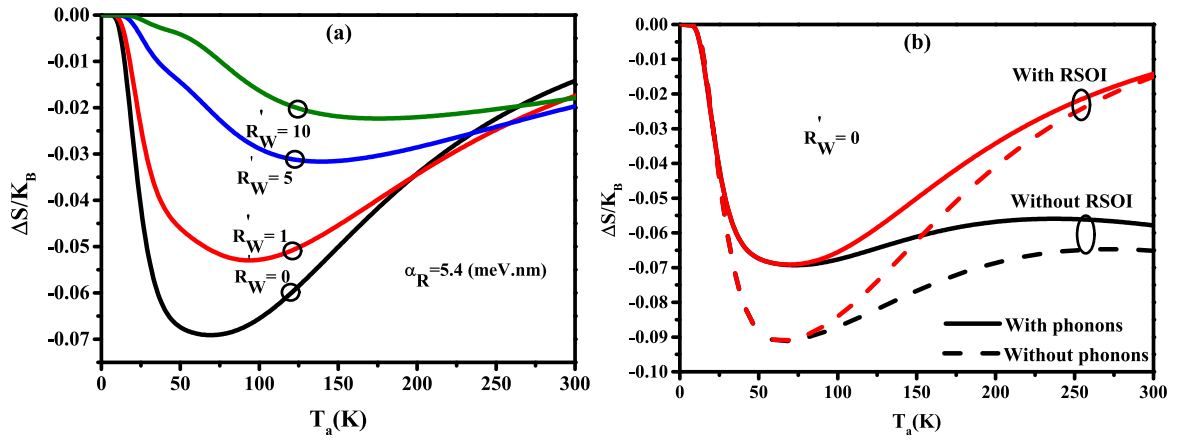


FIGURE 4.7 – MCE en fonction de la température ; (a) pour différentes valeurs du paramètre de Wigner, i.e., R'_W , 1, 5, et (b) avec et sans RSOI.

La fig. 4.7 présente la variation du changement d'entropie (ΔS) en fonction de la température. Il montre l'évolution de l'intensité du champ magnétique de $B_i = 0.01T$ à $B_f = 5T$. La fig. 4.7(a), présente l'effet du paramètre de Wigner R'_W sur le changement d'entropie(ΔS) à $\alpha_R = 5.4 \text{ meV} \cdot \text{nm}$. Le comportement général du MCE montre que ΔS diminue vers un minimum après, change sa variation, et commence à augmenter à nouveau avec l'augmentation de la température jusqu'à ce qu'il devienne saturé à une valeur limite. La figure montre également que lorsque le paramètre R'_W augmente, le minimum se déplace vers des températures plus élevées et le changement d'entropie augmente. La fig. 4.7(b) présente la variation de (ΔS) en fonction de la température avec et sans RSOI, en présence des interactions électron–LO–phonon. Comme le montre la figure, à basse température, le changement d'entropie est le même dans les deux cas

(avec et sans RSOI) ; cependant, à des températures plus élevées, l'effet de la RSOI sur le changement d'entropie est remarquable. En outre, les interactions électron-phonon permettent de réduire le changement d'entropie du système.

ANNEXE

Cette section décrit la démarche de calcul des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde du système. D'après les équations éq. 4.11 et éq. 4.12, l'Hamiltonien total après la séparation des mouvements de trois électrons en interaction s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{P_\rho^2}{2m_\rho^*} + \frac{P_\lambda^2}{2m_\lambda^*} + \frac{1}{2}m_e^*\Omega^2(\rho^2 + \lambda^2) + \frac{P_R^2}{2M_e} + \frac{1}{8}M_e\omega_c^2 R^2 + \frac{1}{2}\omega_c \sum_{j=1}^3 L_z^{(j)} + \frac{e^2\eta}{\varepsilon\sqrt{\rho^2 + \lambda^2}} \\ & + \frac{\alpha_R}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} + \frac{3}{2}g^*\mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Nous utilisons les coordonnées hypersphériques caractérisées par l'hyperrayon ζ et l'hyperangle κ , qui sont définis par :

$$\zeta^2 = \rho^2 + \lambda^2, \quad \kappa = \arctan\left(\frac{\rho}{\lambda}\right) \quad (4.22)$$

Avec ces transformations, les premier et deuxième termes de l'éq. 4.21 s'expriment comme suit :

$$\frac{P_\rho^2}{2m_\rho^*} + \frac{P_\lambda^2}{2m_\lambda^*} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{3}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+2)}{\zeta^2} \right). \quad (4.23)$$

Par conséquent, l'Hamiltonien décrivant le mouvement relatif est défini par

$$\mathcal{H}_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{3}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+2)}{\zeta^2} \right) + \frac{1}{2}m_e^*\Omega^2\zeta^2 + \frac{e^2\eta}{\varepsilon\zeta} + \frac{l_z}{2}\omega_c \quad (4.24)$$

Avec cette approche, l'équation de Schrödinger qui décrit le mouvement relatif est donnée comme suit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{3}{\zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+2)}{\zeta^2} \right) + \frac{1}{2}m_e^*\Omega^2\zeta^2 + \frac{e^2\eta}{\varepsilon\zeta} + \frac{l_z}{2}\omega_c \right] \phi_{n',m'}(\zeta, \kappa) = E_{rel}\phi_{n',m'}(\zeta, \kappa) \quad (4.25)$$

où la fonction d'onde hyperradiale est donnée par $\phi_{n',m'}(\zeta, \kappa) = \frac{e^{im'\kappa}}{\sqrt{2\pi}} f_{n',m'}(\zeta)$

Nous considérons la transformation suivante [98] : $f_{n',m'}(\zeta) = \zeta^{-\frac{3}{2}} U_{n',m'}(\zeta)$. L'équation (4.25) se réduit alors à la forme

$$\frac{\partial^2 U_{n',m'}(\zeta)}{\partial \zeta^2} + \left[\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_{rel} - \left(\frac{m_e^* \Omega^2 \zeta^2}{\hbar^2} + \frac{m_e^* m' \hbar}{2} \omega_c + \frac{2m_e^* e^2 \eta}{\hbar^2 \varepsilon \zeta} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 2)}{\zeta^2} + \frac{3}{4\zeta^2} \right) \right] U_{n',m'}(\zeta) = 0 \quad (4.26)$$

Lorsque la variable indépendante $\xi = \sqrt{\frac{m_e^* \omega_0}{\hbar}} \zeta$ est modifié, l'équation ci-dessus donne

$$\frac{\partial^2 U_{n',m'}(\xi)}{d\xi^2} - \left[\beta^2 \xi^2 + \frac{2e^2 \eta}{\varepsilon \hbar \omega_0 \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_0}} \xi} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 2) + \frac{3}{4}}{\xi^2} \right] U_{n',m'}(\xi) = \left(\frac{m' \omega_c}{\omega_0} - \frac{2E_{rel}}{\hbar \omega_0} \right) U_{n',m'}(\xi) \quad (4.27)$$

Nous définissons $\varepsilon_{n',m'} = \frac{2E_{rel}}{\hbar \omega_0}$ et $R'_W = \frac{e^2 \eta}{\varepsilon \hbar \omega_0 l_0}$.

On obtient donc

$$\frac{\partial^2 U_{n',m'}(\xi)}{d\xi^2} - \left[\beta^2 \xi^2 + \frac{2R'_W \eta}{\xi} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 2) + \frac{3}{4}}{\xi^2} \right] U_{n',m'}(\xi) = \left(\frac{m' \omega_c}{\omega_0} - \varepsilon_{n',m'} \right) U_{n',m'}(\xi) \quad (4.28)$$

Dans l'équation précédente, le potentiel effectif est défini comme suit :

$$V_{eff}(\xi) = \beta^2 \xi^2 + \frac{2R'_W}{\xi} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 2) + \frac{3}{4}}{\xi^2} \quad (4.29)$$

avec $R'_W = R_W \eta$

De plus, le développement de Taylor de $V_{eff}(\xi)$ donne

$$V_{eff}(\xi) = V_{eff}(\xi)/_{\xi=\xi_0} + \frac{1}{2} \frac{d^2 V_{eff}(\xi)}{d\xi^2} /_{\xi=\xi_0} (\xi - \xi_0)^2 \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial^2 U_{n',m'}(\xi)}{\partial \xi^2} - \Omega_{m'}^2 (\xi - \xi_0)^2 U_{n',m'}(\xi) = \left(\frac{m' \omega_c}{\omega_0} - \varepsilon_{n',m'} + V_{eff}(\xi)/_{\xi=\xi_0} \right) U_{n',m'}(\xi) \quad (4.31)$$

Ici, $\Omega_{m'}^2 = \frac{1}{2} \frac{d^2 V_{eff}(\xi)}{d\xi^2} /_{\xi=\xi_0}$.

La fameuse équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique unidimensionnel est donnée par la formule suivante

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \left(\frac{\mu' \omega'}{\hbar} \right)^2 x^2 \psi(x) = -\frac{2\mu' \epsilon'}{\hbar^2} \psi(x) \quad (4.32)$$

dont les valeurs propres de l'énergie sont $\epsilon' = \left(n' + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega'$.

Une comparaison entre les équations (4.31) et (4.32) permet d'établir la relation suivante :

$$\Omega_{m'}^2 = \left(\frac{\mu'\omega'}{\hbar}\right)^2 \text{ et } \frac{m'\omega_c}{\omega_0} - \varepsilon_{n',m'} + V_{eff}(\xi)/_{\xi=\xi_0} = -\frac{2\mu'\epsilon'}{\hbar^2}$$

Par conséquent, l'énergie est finalement donnée par

$$\varepsilon_{n',m'} = 2\left(n' + \frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{1}{2} \frac{d^2 V_{eff}(\xi)}{d\xi^2} /_{\xi=\xi_0}} + V_{eff}(\xi)/_{\xi=\xi_0} + \frac{m'\omega_c}{\omega_0} \quad (4.33)$$

4.4 Conclusion

Nous avons étudié les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'une boîte quantique à trois électrons. L'importance de la présente étude est à évaluer en tenant compte de toutes les interactions entre électrons, y compris les interactions Coulombiennes entre électrons, les SOI et, surtout, les interactions entre électrons et phonons. Les interactions électron-LO-phonon ont été supposées de la même force que le SOI de Rashba ou de Dresselhaus. Ces contributions polaroniques affectent de manière significative les propriétés magnétiques et thermodynamiques du QD. En outre, les effets polaroniques dominent à faible valeur de champ magnétique, comme on l'observe pour la susceptibilité magnétique (Fig. 4.2) et l'aimantation (Fig. 4.3). L'effet du couplage électron-phonon est beaucoup plus important pour des valeurs plus élevées du RSOI à des valeurs de champ magnétique faibles. Les résultats présentés ici sont importants pour les futures études expérimentales visant à développer de nouveaux dispositifs pour la spintronique.

Propriétés magnéto-transports et magnétocaloriques du semi-conducteur magnétique dilué (Ga,Mn)As dans les systèmes confinés.

5.1	Introduction	78
5.2	Base théorique	80
5.3	Résultats et discussions	82
5.3.1	Propriétés magnétiques	83
5.3.2	Propriétés thermodynamiques	86
5.3.3	Effets magnétocaloriques	90
5.3.4	Propriétés magnéto-transports	91
5.4	Conclusion	92

5.1 Introduction

L'électronique basée sur le spin (spintronique) permet de fabriquer de nouveaux dispositifs optoélectroniques ayant des propriétés fascinantes et fonctionnant à la fois avec les propriétés électriques et de spin [9]. En effet, comparé aux mouvements des porteurs de charge (électron et trou), le spin peut être commuté rapidement entre 2

états. Sur la base de ce concept, de nouveaux composants avec de nouvelles fonctionnalités sont développés : Capteur de magnétorésistance géant utilisé dans la tête de lecture des disques durs pour l'enregistrement à haute densité. Transistor polarisé en spin, émission de lumière polarisée en spin, nanopilier à jonction tunnel magnétique, torque de transfert de spin et effet Hall de spin [9–13].

Cependant, pour fabriquer ces nouveaux dispositifs pour l'électronique du futur, nous devons utiliser des matériaux capables de générer des effets spintroniques. De nombreux matériaux peuvent être cités : Ferromagnétiques semi-métalliques : CrO_2 , pérovskite : $(\text{La},\text{Sr})\text{MnO}_3$; semi-conducteurs magnétiques : EuO , EuS , $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ et CrAs , alliages Heusler : NiMnSb , matériaux anisotropes perpendiculaires $\text{CoFeB}/\text{MgO}/\text{CoFeB}$, matériaux antiferromagnétiques [40].

D'une manière générale, le dopage avec des impuretés magnétiques constitue un autre moyen d'obtenir des semi-conducteurs avec des propriétés spintroniques. Ainsi, pour les semi-conducteurs II-VI, où la valence du cation coïncide avec la valence des ions magnétiques (Mn , Cr), les interactions antiferromagnétiques sont très importantes avec une température de Curie très basse [41]. De même, les semi-conducteurs III-V dopés au Mn , appelés semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), tels que $(\text{Ga},\text{Mn})\text{N}$, $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$, $(\text{Zn},\text{Mn})\text{Te}$ et (Ge,Mn) [42–44], ont attiré une attention considérable ces dernières années en raison de leurs applications potentielles dans le domaine de la spintronique.

Dans ce chapitre, pour comprendre le comportement du DMS $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ avec une forte concentration de Mn qui induit une forte densité de trous, nous développons un modèle simple prenant en compte l'interaction trou-trou dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Pour se rapprocher de la situation réelle, nous avons pris en compte les interactions trou-LO-phonon en utilisant le formalisme de Frohlich. Nous avons calculé les valeurs propres et les fonctions propres de l'énergie d'un système à deux trous confiné dans une boîte quantique parabolique et soumis à un champ magnétique externe. Nous analysons les propriétés magnétiques et thermodynamiques du système. Sur la base des arguments ci-dessus, nous nous focalisons sur les propriétés de magnéto-transport et de magnétocalorique dans le domaine des basses températures et dans des champs magnétiques modérés. Le chapitre est organisé comme suit : La section I traite du modèle théorique et la section II examine les résultats en détail. Les

remarques finales sont présentées dans la dernière section.

5.2 Base théorique

Nous considérons deux trous en interaction confinés dans une boîte quantique et soumis à un champ magnétique perpendiculaire $\vec{B} = (0, 0, B)$ qui est défini dans la jauge de Lorentz par le potentiel vecteur $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$. L'Hamiltonien de ce système sous l'effet de l'interaction avec les phonons est donné par :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \frac{1}{2m_{hh}^*} \sum_{j=1}^2 \left(\vec{P}_j - \frac{e\vec{A}_j}{c} \right)^2 + \frac{1}{2}m_{hh}^*\omega_0^2 \sum_{j=1}^2 r_j^2 + \frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{2}g^*B\mu_B \sum_{j=1}^2 \hat{\sigma}_{z,j} \\ & + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^2 \left[\hat{a}_{\vec{q}} V_{\vec{q}} (\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_j) + H.c.) \right]. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Ici, le premier terme représente l'Hamiltonien des deux trous interagissant dans une boîte quantique sous le potentiel de confinement, qui est supposé être parabolique, où m_{hh}^* représente la masse effective du trou lourd,

L'interaction trou-trou est représentée par le troisième terme de l'équation (5.1), où ε_∞ est la constante diélectrique à haute fréquence.

L'effet Zeeman est donné par le quatrième terme de l'éq. (5.1)

Les deux derniers termes de l'éq. (5.1) définissent l'opérateur cinétique des phonons et l'Hamiltonien représentant le couplage trou-phonon dans le formalisme de Fröhlich [95], respectivement, où $\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger (\hat{a}_{\vec{q}})$ est l'opérateur de création (annihilation) du phonon avec un vecteur d'onde $\vec{q} = (\vec{q}_\parallel, \vec{q}_z)$, ω_{LO} est la fréquence des phonons et $V_{\vec{q}}$ est le coefficient de couplage trou-LO-phonon [102] :

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger du système ($\hat{\mathcal{H}}|i\rangle = E_i|i\rangle$), nous suivons la même approche que celle décrite au chapitres précédentes.

comme nous l'avons déjà vu, l'Hamiltonien du système est la somme de deux parties indépendantes (centre de masse et mouvement relatif), et par conséquent, l'énergie du système est $E = E^{rel} + E^{cm}$.

Les énergies du système en l'absence du potentiel Coulombien et du terme polaronique sont les suivantes [38] :

$$E_{n,m}^{rel(0)} = 2\gamma_1(2n + |m| + 1) - m\gamma_2. \quad (5.2)$$

et

$$E_{N,M}^{cm} = 2\gamma_1(2N + |M| + 1) - M\gamma_2 + \frac{g^*SM_0\gamma_2}{2m_0}. \quad (5.3)$$

Où $\gamma_1 = \frac{\hbar\Omega}{2R^*}$, $\gamma_2 = \frac{\hbar\omega_c}{2R^*}$, $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}$, $\omega_c = \frac{eB}{m_{hh}^*c}$ et $M_0 = 3m_{hh}$. N et M sont les nombres quantiques principal et magnétique des états du CM et n et m sont les nombres quantiques principal et magnétique des états du mouvement relatif. m et M peuvent prendre les valeurs $0, \pm 1, \pm 2 \dots$

Si on tient compte du potentiel coulombien et du couplage trou-LO-phonon, l'énergie de la partie relative peut être calculée en calculant l'expression complète de l'énergie :

$$E_{n,m}^{rel} = 2\gamma_1(2n + |m| + 1) - m\gamma_2 + \langle f_{n,m}(r) | V_{h-ph}^{int}(r) | f_{n',m'}(r) \rangle, \quad (5.4)$$

où la valeur moyenne de l'interaction trou-trou et de l'interaction trou-LO-phonon est obtenue en déterminant les éléments de la matrice :

$$\langle \Psi_{n,m} | V_{e-ph}^{int}(r) | \Psi_{n',m'} \rangle = \int_0^\infty f_{n,m}^*(r) V_{h-ph}^{int}(r) f_{n',m'}(r) \delta_{nn'} \delta_{mm'} r dr. \quad (5.5)$$

avec $\delta_{nn'}$ et $\delta_{mm'}$ sont les symboles du delta de Kronecker.

$f_{n,m}(\rho)$ est la fonction d'onde radiale normalisée définie par :

$$f_{n,m}(\rho) = \left(\frac{2a^2 n!}{(n + |m|)!} \right)^{1/2} (a\rho)^{|m|} L_n^{|m|}(a^2 \rho^2) \exp(-a^2 \rho^2/2), \quad (5.6)$$

dans laquelle $a = \sqrt{\frac{m_{hh}^* \Omega}{2\hbar}}$ représente l'inverse de la taille effective la boîte quantique, qui dépend à la fois de la taille géométrique et du champ magnétique. $L_n^{|m|}(a^2 \rho^2)$ indique le polynôme de Laguerre.

La détermination des fonctions d'onde et des valeurs propres de l'énergie permet de calculer les propriétés de magnéto-transport associées. Semi-classiquement, le mouvement circulaire d'un trou implique l'existence d'un courant azimuthal. La densité de courant correspondante $\vec{j}_{n,m}$ portée par l'orbitale définie en mécanique quantique avec les nombres quantiques n et m peut être obtenue par la formule suivante [103, 104] :

$$\vec{j}_{n,m} = - \left[\frac{e\hbar}{m_{hh}^*} I_m(\Psi^* \nabla \Psi) + \frac{e^2}{m_{hh}^*} \vec{A} \Psi^* \Psi \right]. \quad (5.7)$$

En intégrant cette expression, on peut calculer le courant J transporté par l'état avec des nombres quantiques définis n, m . Le résultat est donné par

$$J_{n,m} = \int_0^\infty j_{n,m}(\rho) d\rho. \quad (5.8)$$

Le courant persistant total est la somme des contributions du mouvement CM J^{cm} et de la contribution du mouvement relatif J^{rel} :

$$J = J^{cm} + J^{rel}. \quad (5.9)$$

Pour le CM, le problème est identique à celui d'un système à un seul trou, et le calcul de la densité de courant est donc basé sur l'équation (5.8). Le résultat est donné comme suit

$$J_{N,M}^{cm} = \int_0^\infty -\frac{1}{2\pi} \frac{e\hbar}{m_{hh}^*} \left[\frac{M}{R} + \frac{e}{\hbar} A(R) \right] f_{N,M}^2(R) dR. \quad (5.10)$$

Le courant induit par le mouvement relatif est obtenu de manière classique à l'aide de l'équation (5.8)

$$J_{n,m}^{rel} = -\frac{e\omega_0}{2\pi} \left(1 + \frac{1}{4} \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \right)^{\frac{1}{2}} m \times \sum_{n,n'=0}^\infty \left(\frac{n!}{(n+|m|)!} \frac{n'!}{(n'+|m|)!} \right)^{\frac{1}{2}} \\ \times \int_0^\infty e^{-x} x^{|m|-1} L_n^{|m|}(x) L_{n'}^{|m|}(x) dx - \frac{e}{4\pi} \omega_c. \quad (5.11)$$

Le courant persistant I à température finie $\mathcal{T}$ qui nous intéresse principalement est obtenu en calculant la moyenne d'ensemble de $J_{N,M}^{cm} + J_{n,m}^{rel}$ dans l'ensemble canonique, dont l'expression explicite est donnée par

$$I = \frac{1}{Z_{cm}} \sum_N \sum_M J_{N,M}^{cm} e^{-\beta E_{N,M}^{cm}} + \frac{1}{Z_{rel}} \sum_n \sum_m J_{n,m}^{rel} e^{-\beta E_{n,m}^{rel}}. \quad (5.12)$$

5.3 Résultats et discussions

Le calcul numérique de notre formalisme est appliqué essentiellement au $(Ga, Mn)As$ contenant 3% de Mn où ce matériau est susceptible d'avoir un comportement antiferromagnétique. Le tableau 5.1 présente tous les paramètres physiques utilisés dans cette étude, extraits des références [105–110].

pour caractériser la force relative du confinement, nous avons introduit la longueur du potentiel harmonique $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_{hh}^* \omega_0}}$, définie en termes de masse du trou lourd. Dans ce travail, nous analysons deux valeurs limites de la force de confinement : $l_0 = 25$

$\text{\AA}$ ($\hbar\omega_0 = 23.9 \text{ meV}$) et $l_0 = 50 \text{ \AA}$ ($\hbar\omega_0 = 6 \text{ meV}$). Le premier cas correspond à un confinement fort avec $l_0 \leq a^*$ (a^* est le rayon de Bohr indiqué dans le tableau 5.1) tandis que le second cas correspond à un confinement faible avec $l_0 > a^*$.

TABLE 5.1 – Paramètres de (Ga,Mn)As utilisés dans les calculs.

Material	m_e^*/m_0	m_{hh}^*/m_0	$E_g(\text{eV})$	ϵ_0	ϵ_∞	$a^*(\text{\AA})$	$R^*(\text{meV})$	$\hbar\omega_{LO}(\text{meV})$	$\hbar\omega_{TO}(\text{meV})$	g^*	S
(Ga,Mn)As	0.067	0.5	1.50	13.99	11.8	25	24.4	33.29	36.25	2	$\frac{5}{2}$

5.3.1 Propriétés magnétiques

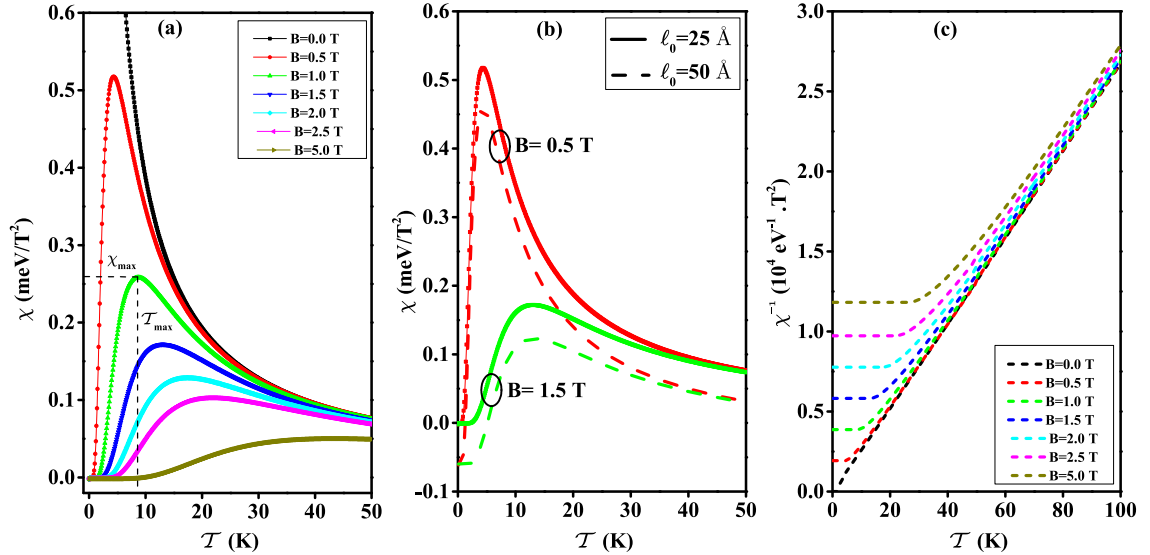


FIGURE 5.1 – (a) Susceptibilité magnétique (χ) en fonction de la température pour différentes valeurs du champ magnétique. (b) χ en fonction de la température dans les deux cas de confinement $l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$. (c) susceptibilité inverse χ^{-1} en fonction de la température.

La fig. 5.1(a) représente la dépendance en température des courbes de susceptibilité magnétique (χ) dans un champ magnétique appliqué entre 0 et 5 T. La première observation que nous pouvons faire ici est qu'à $B = 0 \text{ T}$, $\chi(T)$ varie selon la loi $T^{-\alpha}$, avec $\alpha \simeq 1$. A $B \neq 0 \text{ T}$, $\chi(T)$ change son comportement et présente un maximum $\chi_{\text{max}}(T)$ à une température spécifique T_c . Au-delà de cette température, le système perd son aimantation et tend vers un régime de saturation. Notre calcul montre que le

pic de la susceptibilité perd de son intensité et se déplace vers des $\mathcal{T}$ plus élevés avec l'augmentation du champ magnétique.

Afin d'analyser l'influence du degré de confinement sur la susceptibilité, nous avons représenté sur la fig. 5.1(b) la variation de $\chi(\mathcal{T})$ pour deux forces de confinement $l_0 = 25$ Å et $l_0 = 50$ Å et pour deux valeurs du champ magnétique ($B = 0.5$ et 1.5 T). le calcul montre que la susceptibilité magnétique est plus prononcée en cas de confinement fort ($l_0 = 25$ Å) et que les maxima se produisent approximativement à la même température critique, indépendamment du degré de confinement.

Dans la fig. 5.1(c), nous avons tracé l'inverse de la susceptibilité magnétique $\chi^{-1}(\mathcal{T})$. Elle montre que $\chi^{-1}(\mathcal{T})$ présente un comportement linéaire décrit par la loi de Curie-Weiss $\chi = C/(\mathcal{T} + \theta)$, où $C = \frac{N\mu_{eff}^2}{3K_B}$ [111] est appelée constante de Curie et θ est la température paramagnétique de Weiss. La linéarisation de $\chi^{-1}(\mathcal{T})$ nous permet de déterminer les valeurs de θ et C . Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 5.2. La valeur négative observée de θ montre que l'interaction antiferromagnétique est associée à l'ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en accord avec plusieurs études [112–115].

TABLE 5.2 – Constante de Curie (C) et température paramagnétique de Weiss (θ).

$B(T)$	0	0.5	1	1.5	2	2.5	5
$C(meVT^{-2}K)$	3.3064	3.3067	3.3074	3.3088	3.3106	3.3131	3.3334
$\theta(K)$	-23.46	-23.40	-23.23	-22.94	-22.52	-21.98	-17.45

La fig. 5.2(a) représente la dépendance de B avec l'aimantation ($\mathcal{M}$), pour différentes valeurs de température (de $\mathcal{T} = 0$ K à $\mathcal{T} = 50$ K) et pour $l_0 = 25$ Å. On constate que les courbes d'aimantation augmentent rapidement pour un champ magnétique faible et tendent ensuite à saturer lorsque le champ augmente. Afin d'étudier la réversibilité magnétique, les courbes d'aimantation ont été étudiées dans une phase d'augmentation et de diminution du champ ($B(T) = [-5, +5]$). En conclusion, pas d'hystérésis magnétique, ce qui indique que les transitions magnétiques sont parfaitement réversibles. L'encadré de la fig. 5.2(a) montre que le même comportement est préservé pour les deux types de confinement ($l_0 = 25$ Å and $l_0 = 25$ Å) et pour deux valeurs de

la température ($\mathcal{T} = 5 \text{ K}$ et $\mathcal{T} = 10 \text{ K}$). Nous pouvons également remarquer que l'aimantation est plus importante pour les régimes de confinement forts.

Pour mieux comprendre la dépendance à la température, la fig. 5.2(b) montre la variation de l'aimantation en fonction de température pour différentes intensités de champ magnétique $0 - 5 \text{ T}$. À basse température, l'aimantation est maximale, alors qu'elle tend progressivement vers zéro avec l'augmentation de la température, ce qui conduit à l'apparition d'un ordre paramagnétique. Ces résultats correspondent parfaitement aux principes de la loi Curie-Weiss. Cependant, pour un champ magnétique donné, l'aimantation tend à s'aligner progressivement dans la même direction que le champ magnétique, à mesure que l'intensité de celle-ci augmente.

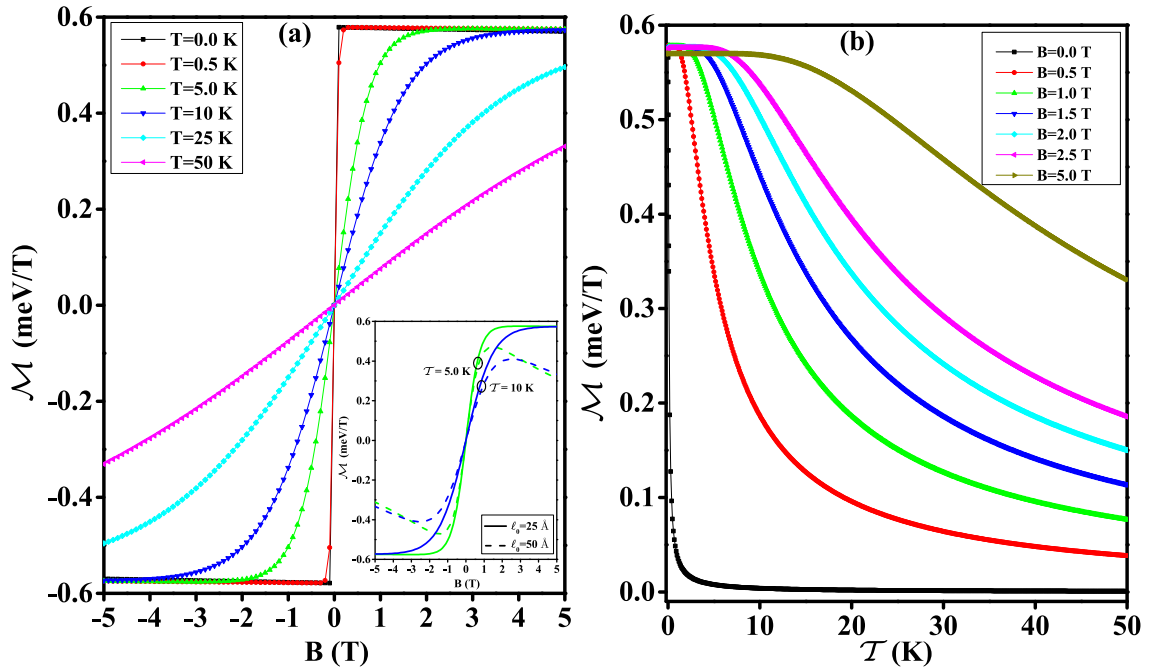


FIGURE 5.2 – (a) La dépendance de l'aimantation au champ magnétique pour différentes valeurs de température. L'encadré montre la dépendance de l'aimantation à la température pour les deux cas $l_0 = 25 \text{ Å}$ et $l_0 = 50 \text{ Å}$. (b) montre la dépendance de l'aimantation à la température pour différentes valeurs du champ magnétique.

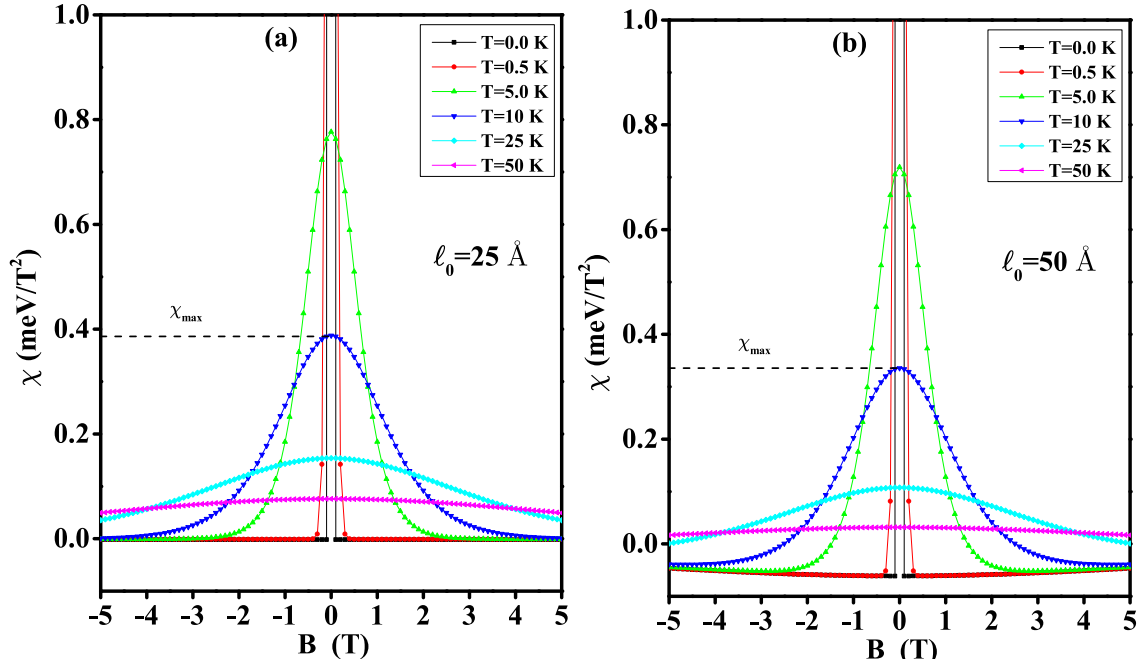


FIGURE 5.3 – χ en fonction du champ magnétique pour différentes valeurs de température : (a) pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) pour $l_0 = 50 \text{ \AA}$.

La fig. 5.3(a) représente la variation de la susceptibilité magnétique χ en fonction de l'intensité du champ magnétique pour différentes températures comprises entre 0 and $50K$ pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$. Pour toutes températures considérées, la susceptibilité magnétique augmente avec l'intensité du champ magnétique jusqu'à un maximum, puis elle commence à diminuer. De plus, les pics de susceptibilité diminuent avec l'augmentation de la température. Comme on peut le voir sur la figure, les courbes de χ diminuent rapidement à faible champ magnétique puis tendent vers zéro lorsque le champ augmente, ce qui traduit la saturation de l'ordre antiferromagnétique. La figure 5.3(b) représente la variation de χ dans le cas de $l_0 = 50 \text{ \AA}$. Le comportement est similaire à celui observé dans la fig. 5.3(a), sauf que les courbes de susceptibilité sont moins prononcées que dans la figure précédente.

5.3.2 Propriétés thermodynamiques

Commençons par la capacité thermique C_V , la fig. 5.4(a), illustre la variation de cette quantité en fonction de la température pour différentes valeurs de champs magnétiques. ($B = 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5$ et 5 T) à $l_0 = 25 \text{ \AA}$. La principale remarque que nous pouvons faire ici est l'existence d'un pic observé dans les courbes de capacité ther-

mique, qui correspond à l'anomalie de Schottky souvent détectée dans les matériaux de faible dimension. Cependant, un champ magnétique appliqué entre $0,5 T$ et $5 T$ déplace cette anomalie à une certaine température. Le pic de capacité thermique résulte de l'absorption de chaleur pendant la transition de phase. Une fois qu'un champ magnétique est appliqué, le phénomène de polarisation des moments magnétiques se produit dans une gamme de température étendue, ce qui élargit le pic maximal [116].

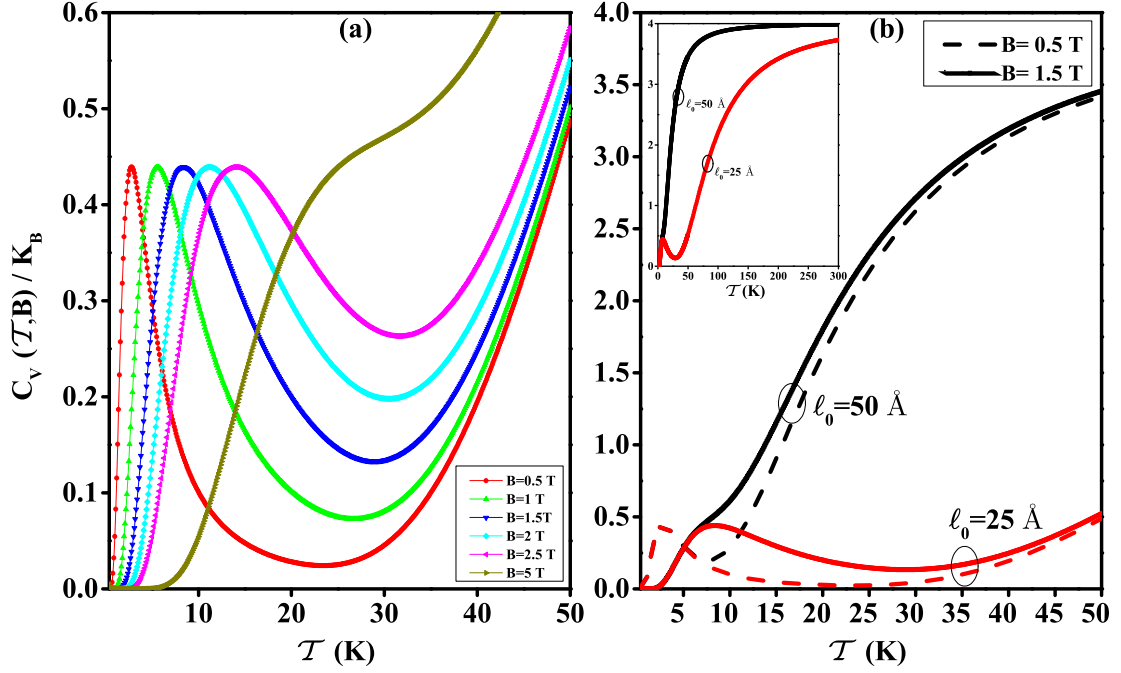


FIGURE 5.4 – Capacité thermique en fonction de la température, (a) dans la gamme de champ magnétique de $B = 0,5$ à $B = 5 T$ pour $l_0 = 25 \text{ \AA}$, (b) pour les deux cas de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$).

La fig. 5.4(b), montre la variation de la capacité thermique en fonction de la température pour deux forces de confinement $l_0 = 25 \text{ \AA}$ ($\hbar\omega_0 = 23.9 \text{ meV}$) et $l_0 = 50 \text{ \AA}$ ($\hbar\omega_0 = 6 \text{ meV}$) correspond à un confinement fort et faible, respectivement, et pour deux valeurs du champ magnétique ($B = 0.5 T$ et $B = 1.5 T$). Il est intéressant de noter que jusqu'à $6 K$, la capacité calorifique a le même comportement pour les deux valeurs de champ magnétique et pour les deux forces de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$). En revanche, à partir de cette température, la capacité calorifique correspondant à un confinement faible ($l_0 = 50 \text{ \AA}$) commence à augmenter avec la température puis tend à saturer autour de $300 K$ (voir l'encadré de la fig. 5.4(b)). Cependant, pour un confinement fort ($l_0 = 25 \text{ \AA}$), les courbes de capacité calorifique montrent un mini-

mun centré autour de 30–33 K , puis commencent à augmenter au fur et à mesure que la température augmente et tendent ensuite à saturer approximativement à 300 K , comme dans le cas d'un confinement faible. Il est intéressant de noter que pour une force de confinement de 50 $\text{\AA}$, la capacité calorifique est dominante par rapport à celle de 25 $\text{\AA}$.

La capacité calorifique dépend aussi directement de l'entropie magnétique du système ($S(\mathcal{T}, B)$) par $S(\mathcal{T}, B) = \int \frac{C_v}{\mathcal{T}} d\mathcal{T}$. Actuellement, cette quantité est l'objet d'une attention croissante dans la recherche d'applications potentielles en spintronique.

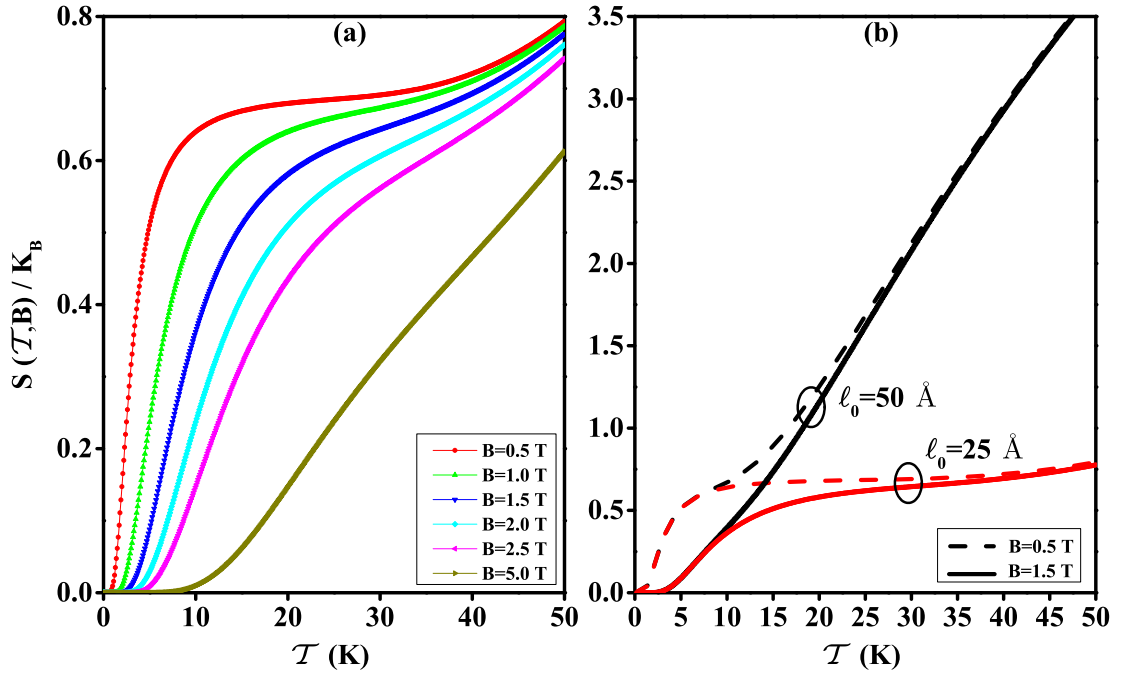


FIGURE 5.5 – Entropie en fonction de la température, (a) dans la gamme de champ magnétique de $B = 0,5$ à $B = 5$ T pour $l_0 = 25$ $\text{\AA}$, (b) pour les deux cas de confinement ($l_0 = 25$ $\text{\AA}$ et $l_0 = 50$ $\text{\AA}$).

La fig. 5.5(a) illustre la variation d'entropie en fonction de la température pour différentes valeurs de champs magnétiques. On constate qu'à température nulle, l'entropie du système est nulle, tandis que la température augmentant, $S(\mathcal{T}, B)$ augmente également, car elle accroît le caractère aléatoire du système. En outre, nous pouvons constater que l'entropie diminue à mesure que l'intensité du champ magnétique augmente (de 0.5 à 5 T). La fig. 5.5(b) montre la variation de l'entropie en fonction de la température pour deux forces de confinement $l_0 = 25$ $\text{\AA}$ ($\hbar\omega_0 = 23.9$ meV) et $l_0 = 50$ $\text{\AA}$ ($\hbar\omega_0 = 6$ meV) correspond à un confinement fort et faible, respectivement, avec deux

valeurs de champ magnétique $B = 0.5$ et $B = 1.5$ T. Nos calculs montrent que dans le cas du confinement fort ($l_0 = 25$ Å), l'entropie est moins sensible à la température.

Dans la fig. 5.6(a), nous présentons l'évolution de la capacité calorifique du système en fonction de B pour certaines valeurs de température. A $\mathcal{T} = 0$ K la capacité calorifique est nulle pour toutes valeurs de B . A $\mathcal{T} \neq 0$ K, la valeur de C_V à 0,5 K présente un maximum autour de 0,1 T. Avec l'augmentation du champ magnétique, C_V varie et l'anomalie devient plus importante. De même, l'anomalie se déplace vers des B plus élevés lorsque la température augmente. Dans tous les cas, C_V semble s'annuler lorsque B est suffisamment élevé [117]. Pour mieux comprendre l'effet de la force de confinement, nous avons représenté la fig. 5.6(b) qui montre la variation de l'entropie en fonction de B avec différentes valeurs de températures. La figure montre que B réduit l'entropie du système et que la température l'augmente. Il est intéressant de noter que lorsque $\mathcal{T} \rightarrow 0$, l'entropie devient nulle, comme l'exigent les lois de la thermodynamique.

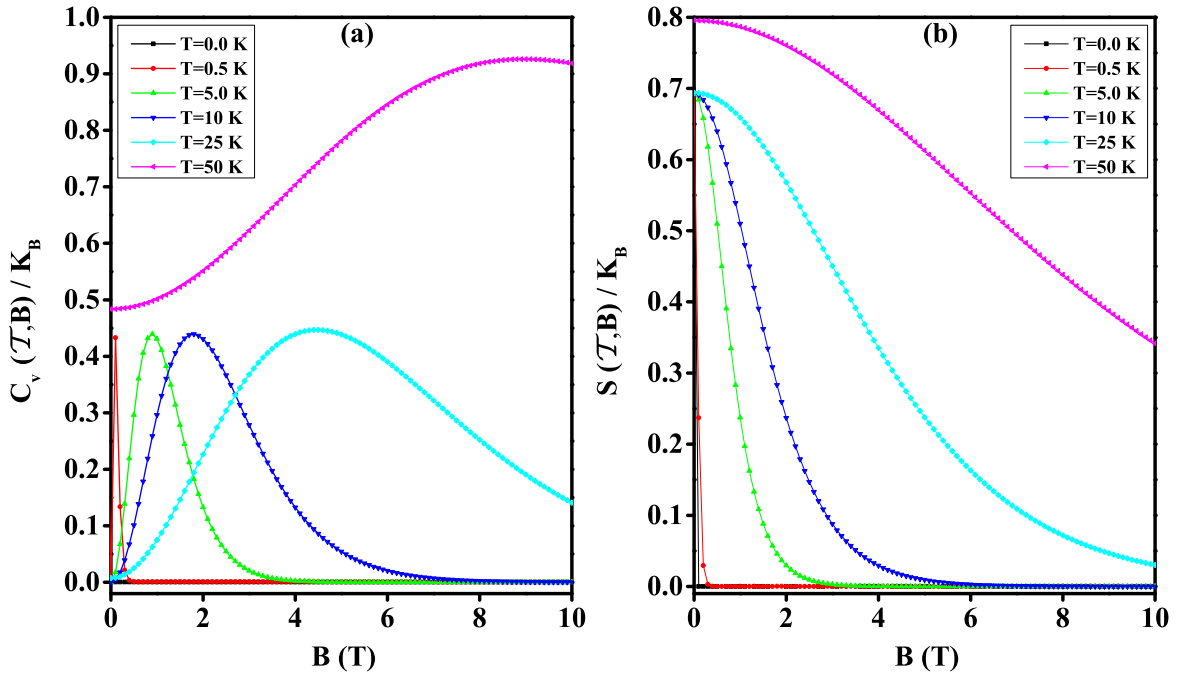


FIGURE 5.6 – Capacité thermique (a) et entropie (b) en fonction du champ magnétique, pour différentes valeurs de température ($\mathcal{T} = 0, \mathcal{T} = 0.5, \mathcal{T} = 5, \mathcal{T} = 10, \mathcal{T} = 25$ et $\mathcal{T} = 50$ K), avec $l_0 = 25$ Å.

5.3.3 Effets magnétocaloriques

Comme indiqué précédemment, la magnitude du MCE est décrite par le changement d'entropie ΔS_M et/ou $\Delta \mathcal{T}_{ad}$. La dépendance en température du ΔS_M est représentée sur la fig. 5.7(a) pour différents champ magnétique. Comme le montre la figure, la valeur maximale du changement d'entropie est trouvée à ($|\frac{\Delta S_M}{K_B}| = 0.29$) qui correspond à la variation du champ $\Delta B = 0.5T$. Lorsque le champ magnétique appliqué augmente, le maximum augmente linéairement jusqu'à atteindre une valeur de 0,54 pour une variation de champ de 2 T. $\Delta \mathcal{T}_{ad}$, une quantité importante pour analyser les matériaux magnétiques réfrigérants, est estimé à l'aide de l'éq. ???. Fig. 5.7(b) illustre la variation de $\Delta \mathcal{T}_{ad}$ en fonction de la température pour différents champ magnétique. $\Delta \mathcal{T}_{ad}$ atteint une valeur maximale de 30K sous un changement de champ de 0,5T, cette valeur augmente au fur et à mesure que le champ magnétique appliqué augmente et atteint un maximum de 178 K pour 2 T. Ce résultat suggère que $(Ga, Mn)As$ est un bon candidat pour des applications en spintronique.

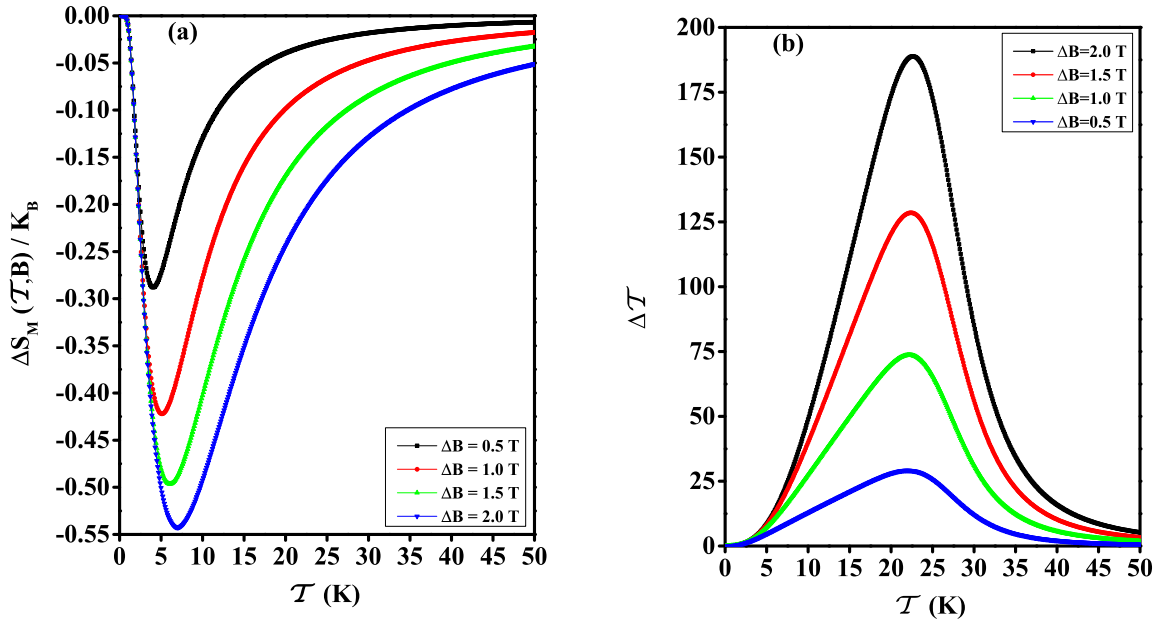


FIGURE 5.7 – Variation de ΔS_M (a) et $\Delta \mathcal{T}_{ad}$ (b) pour $\Delta B = 0.5, 1, 1.5$, et $\Delta B = 2$ T, à $l_0 = 25$ Å.

5.3.4 Propriétés magnéto-transports

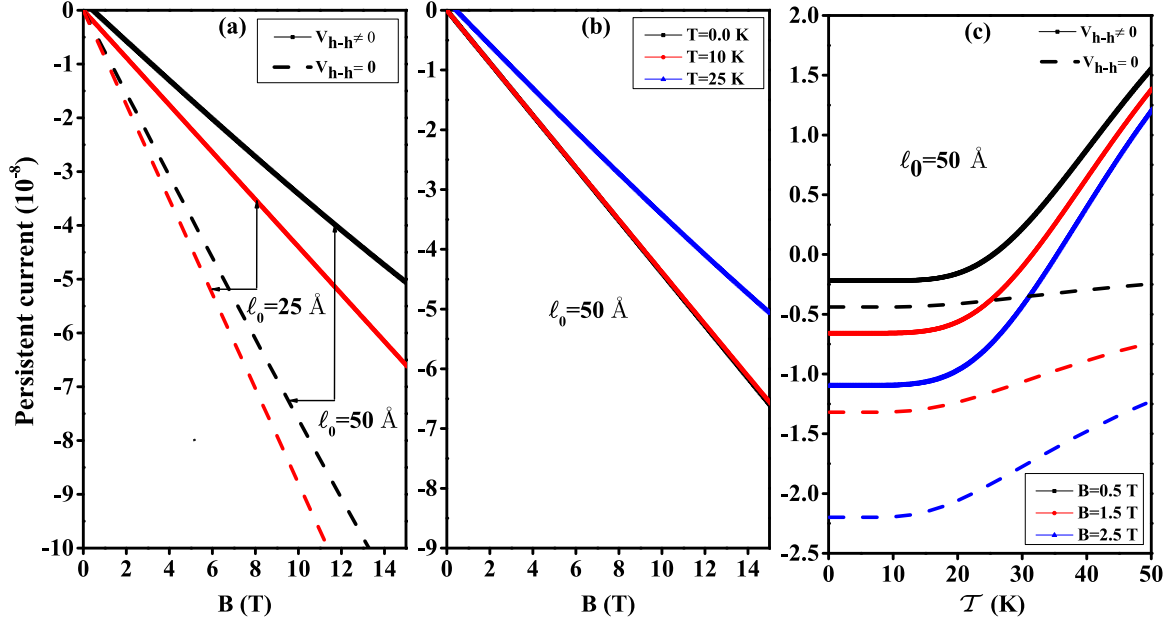


FIGURE 5.8 – (a) Courants persistants I en fonction de B à température nulle pour les cas de confinement ($l_0 = 25 \text{ \AA}$ et $l_0 = 50 \text{ \AA}$), (b) I en fonction de B à température finie, (c) I en fonction de température pour $B = 0.5$, $B = 1.5$, et $B = 2.5 \text{ T}$, à $l_0 = 50 \text{ \AA}$ en tenant compte de l'effet des interactions trou-trou.

Nous discuterons ici les courants persistants résultant. Nous rappelons que le calcul des courants persistants est similaire à celui des valeurs propres de l'énergie relative. Dans un premier temps, nous examinerons les résultats pour des trous sans interaction, dans ce cas où le mouvement relatif est similaire à celui d'un seul trou. Dans ce cas, les courants persistants I sont obtenus avec les valeurs de $J^{c.m}$ et J^{rel} calculées dans l'état fondamental qui est caractérisé par ses nombres quantiques $N = 0$, $M = 0$, $n = 0$ et $m = 0$. Les résultats sont présentés dans la fig. 5.8(a), dans laquelle la variation du courant I est représentée avec le champ magnétique (B). On observe que I décroît linéairement avec les champs magnétiques. Cependant, l'effet de l'interaction trou-trou est important pour des champs magnétiques plus forts. Il est également intéressant de noter que pour un confinement de $l_0 = 50 \text{ \AA}$ le courant est dominant par rapport à celui de $l_0 = 25 \text{ \AA}$. Ces résultats sont généralement en accord avec la majorité des travaux antérieurs [109, 118].

De plus, pour étudier l'effet de la température, nous avons représenté sur la fig.

5.8(b) la variation du courant en fonction du champ magnétique pour quelques valeurs de température ($\mathcal{T} = 0, \mathcal{T} = 10$ et $\mathcal{T} = 25$ K). Il apparaît clairement que la température augmente le courant. La fig. 5.8(c), montre la variation du courant en fonction de la température. Au fur et à mesure que la température augmente, on peut clairement constater que les amplitudes des courants persistants du système augmentent également pour toutes valeurs de champ magnétique.

5.4 Conclusion

En résumé, les propriétés de magnéto-transport et de magnétocalorique du semi-conducteur dilué $(Ga, Mn)As$ contenant 3% Mn dans des systèmes confinés ont été étudiées en détail. Les résultats obtenus montrent que les propriétés de magnéto-transport et de magnétocalorique sont influencées par le champ magnétique, les interactions trou-LO-phonon et le confinement quantique. L'analyse de l'aimantation et de la susceptibilité confirme que la phase antiferromagnétique est associée à un ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en bon accord avec la majorité des travaux antérieurs.

Le calcul des courants persistants créés par deux trous dans une boîte quantique a été effectué dans les deux cas, avec et sans interaction coulombienne. À très basse température, le courant n'est pas influencé par l'interaction coulombienne pour des champs magnétiques faibles. Cependant, l'effet de cet interaction est important pour des champs magnétiques plus forts.

Conclusion générale

En conclusion, notre travail a été consacré à l'étude des propriétés magnétiques, thermodynamiques, magnétocaloriques et de magnéto-transport dans les systèmes confinés en présence des effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon/trou-phonon.

Le premier chapitre est consacré à des généralités sur les nanostructures semi-conductrices. Nous avons décrit premièrement, les différents types de confinement de semi-conducteurs, y compris, le confinement 3D, 2D, 1D et 0D, nous avons donné une description détaillée des semi-conducteurs magnétiques dilués et leurs applications dans différents domaines. Dans le deuxième chapitre, nous avons

Dans le deuxième chapitre, nous avons passé en revue, le magnétisme et l'interaction spin-orbite, nous avons étudié plus en détail l'origine de l'interaction spin-orbite et les effets de Rashba et Dresselhaus.

Au troisième chapitre, nous avons décrit le comportement d'un système à deux électrons confinés et soumis à un champ magnétique appliqué, en présence du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon. nous avons résolu l'équation de Schrödinger pour obtenir les niveaux d'énergie. puis nous avons obtenu toutes les fonctions thermodynamiques en utilisant l'ensemble canonique. Le calcul numérique de notre formalisme est appliqué essentiellement aux composés du groupe $(III - V)$ GaN et $InAs$. Notre calcul montre qu'à $B = 0T$, le système présente un comportement diamagnétique pour toutes températures, et avec une augmentation du champ magnétique, le système présente un comportement paramagnétique pour les deux cas associés "avec et sans effet polaronique".

Dans le chapitre 4 nous avons étudié les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'une boîte quantique à trois électrons. L'importance de cet étude est à évaluer en tenant compte de toutes les interactions entre électrons, y compris les interactions Coulombiennes entre électrons, les SOI et, surtout, les interactions entre électrons et phonons. nos résultats montrent que l'effet du couplage électron-phonon est beaucoup plus important pour des valeurs plus élevées du RSOI à des valeurs de champ magnétique faibles. Les résultats présentés dans ce chapitre sont importants pour les futures études expérimentales visant à développer de nouveaux dispositifs pour la spintronique. Au dernier chapitre, nous avons étudié en détail les propriétés de magnéto-transport et de magnétocalorique du semi-conducteur dilué $(Ga, Mn)As$ contenant 3% Mn dans des systèmes confinés. L'analyse de l'aimantation et de la susceptibilité confirme que la phase antiferromagnétique est associée à un ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en bon accord avec la majorité des travaux antérieurs.

Bibliographie

- [1] C. Gong, and X. Zhang, Science, **363**, 6428 (2019).
- [2] T. Gunst, T. Markussen, K. Stokbro, and M. Brandbyge, Phys. Rev. B, **93**, 035414 (2016).
- [3] S. Maekawa, Concepts in Spin Electronics. Oxford Univ Press (2006).
- [4] B. Divinskiy, S. Urazhdin, S. O. Demokritov, and V. E. Demidov, Nature communications, **10(1)**, 1(2019).
- [5] L. Wenqing, X. Yongbing, Spintronic 2D Materials : Fundamentals and Applications, Elsevier (2019).
- [6] G. Dresselhaus, Phys. Rev., **100(2)**, 580 (1955).
- [7] E. I. Rashba, Soviet Physics, Solid State, **2**, 1109 (1960).
- [8] Y. Khoshbakht, R. Khordad, H.R. Rastegar Sedehi, J. Low Temperature Physics, **202**, 59 (2021).
- [9] H. Ohno, Making Nonmagnetic Semiconductors Ferromagnetic, Science, **281** (1998) 951-956. DOI : 10.1126/science.281.5379.95.
- [10] R. Flederling, M. Kelm, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, L.W. Molenkamp, Injection and detection of a spin-polarized current in a light emitting diode, Nature, **402** (1999) 787-789. <https://doi.org/10.1038/45502>.
- [11] Y. Ohno, D.K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, D.D. Awschalom, Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure, Nature, **402** (1999) 790-792. <https://doi.org/10.1038/45509>.

- [12] H. Ohno, Properties of ferromagnetic III V semiconductors, J. Magn. Magn. Mater., **200** (1999) 110-129. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(99\)00444-8](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(99)00444-8).
- [13] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, Zener model description of ferromagnetism in zinc blende magnetic semiconductors, Science, **287** (2000) 1019-1022. DOI :10.1126/science.287.5455.1019.
- [14] D.P. DiVincenzo, Quantum computing and single-qubit measurements using the spin filter effect, J. Appl. Phys., **85** (1999) 4785-4787. <https://doi.org/10.1063/1.370481>.
- [15] A. Manchon, H.C. Koo, J. Nitta, S.M. Frolov, R.A. Duine, New perspectives for Rashba spin orbit coupling, Nature materials, **14** (2015) 871-882. <https://doi.org/10.1038/nmat4360>.
- [16] U. Meirav, M. A. Kastner, S. J. Wind, Phys. Rev. Lett. **65**, 771 (1990).
- [17] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. Pfeifer, K. W. Baldwin, K. W. West, Phys. Rev. Lett. **71**, 613 (1993).
- [18] H. Drexler, D. Leonard, W. Hansen, J.P. Kotthaus, P.M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **73**, 2252 (1994).
- [19] S. Tarucha, D.G. Austing, T. Honda, R. J. van der Hage, L.P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. **77**, 3613 (1996).
- [20] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, Physica E **4**, 1 (1999).
- [21] M. Wagner, U. Merkt, A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **45**, 1951 (1992).
- [22] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Phys. Rev. B **59**, 13036 (1999).
- [23] M.Z. Malik, D.S. Kumar, S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee, Physica E **121**, 114097 (2020).
- [24] J. L. Zhu, Z. Q. Li, J. Z. Yu, K. Ohno, and Y. Kawazoe, Phys. Rev. B **55**, 15819 (1997).
- [25] A. John Peter, S. Saravana Kumar, Physica E **41**,138 (2008).

- [26] A. Rejo Jeice, K. Navaneethakrishnan, Braz. J. Phys. **39**, 526(2009).
- [27] N.G. Aghekyan, E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan, Superlattices Microstruct. **50**, 199 (2011).
- [28] T. Prosted, J.P. Hansen, C.J. Wesslen, E. Lindroth, E. Rsnen, Eur. Phys. J. B **86**, 430 (2013) .
- [29] E. Sadeghi, M. Moradi Lm, Physica E **70**, 141 (2015).
- [30] A. Boda, D. S. Kumar, I. V. Sankar, A. Chatterjee, J. Magn. Magn Mater, **418**, 242 (2016).
- [31] M. Taut, Phys. Rev. A **48**, 3561 (1993).
- [32] D.S. Kumar, S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee, J. Magn. Magn. Mater **418**, 169-174 (2016).
- [33] S. I. Pekar, Research on Electron Theory of Crystals (AEC, Division of Technical Information, Washington, D. C., 1963)
S. I. Pekar, Untersuchungen uber die Elektronentheorie der Kristalle (Akademie-Verlag, Berlin, 1954).
- [34] T.D. Lee, F.E. Low, D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953) .
- [35] E. Feddi, M. El Haouari, E. Assaid, B. Stébé, J. El Khamkhami, and F. Dujardin, Phys. Rev. B, **68**, 235313 (2003).
- [36] J. El Khamkhami, E. Feddi, E. Assaid, F. Dujardin, B. Stébé, and M. El Haouari, Phys. E, **25**, 366 (2005).
- [37] M. El Haouari, E. Feddi, F. Dujardin, R. L. Restrepo, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, Superlattices and Microstructures, **111**, 457 (2017).
- [38] K. Lakaal, M. Kria, J. El Hamdaoui, Varsha, V. Prasad, Vijit V. Nautiyal, M. El-Yadri, L.M. Pérez, D. Laroze, E. Feddi, Polaronic corrections on magnetization and thermodynamic properties of electron electron in 2D systems with Rashba spin orbit coupling, J. Magn. Magn. Mater., **551** (2022) 169042 (10pp).
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169042>.

- [39] K. Lakaal, L.M. Pérez, M. Kria, J. El Hamdaoui, C. O. Edet, V. Prasad, ... and E. Feddi, Effects of electron–phonon coupling and Rashba spin–orbit interaction on thermodynamic and magnetic properties of quantum dots. *Chinese Journal of Physics*, **89**, 390-403 (2024) <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.045>.
- [40] X. Li, and J. Yang, *National Science Review*, **3**(3), 365-381 (2016).
- [41] A. Titov, X. Biquard, D. Halley, S. Kuroda, E. Bellet-Amalric, H. Mariette, ... and Y. A. Uspenskii, *Physical Review B*, **72**(11), 115209 (2005).
- [42] H. Ohno, H. Munekata, Y. T. Penney, S. Von Molnar, and L. L. Chang, *Physical Review Letters*, **68**(17), 2664 (1992).
- [43] H. Ohno, N. A. Shen, A. F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, and Y. Iye, *Applied Physics Letters*, **69**(3), 363-365 (1996).
- [44] H. Munekata, H. Ohno, S. Von Molnar, A. Segmüller, L. L. Chang, and L. Esaki, *Physical Review Letters*, **63**(17), 1849 (1989).
- [45] A. Oiwa, S. Katsumoto, A. Endo, M. Hirasawa, Y. Iye, H. Ohno, ... and Y. Sugawara, *Solid state communications*, **103**(4), 209-213 (1997).
- [46] T. Dietl, A. Haury, and Y. M. d’Aubigné, *Physical Review B*, **55**(6), R3347 (1997).
- [47] T. Dietl, O. H. Ohno, and F. Matsukura, *Physical Review B*, **63**(19), 195205 (2001).
- [48] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, and Y. Sugawara, *Physical Review B*, **57**(4), R2037 (1998).
- [49] R. R. dos Santos, J. d’Albuquerque e Castro, and L. E. Oliveira, *Journal of applied physics*, **93**(3), 1845-1847 (2003).
- [50] P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2010).
- [51] T. Heinzel, *Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures*, Wiley-VCH, (2006).
- [52] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures*, Oxford University Press, (2009).

- [53] S. Pang, Z. Zhou, Q. Wang, Smart 0D nanomaterials assembled by green luminescent terbium hybrids for the detection of tryptophan, *J. Nanopart. Res.* 15 (3) (2013) 1495.
- [54] Y.S. Zhao, H. Fu, A. Peng, Y. Ma, D. Xiao, J. Yao, Low-dimensional nanomaterials based on small organic molecules : preparation and optoelectronic properties, *Adv. Mater.* 20 (15) (2008) 2859–2876.
- [55] H. Liu, Y. Li, S. Xiao, et al. Synthesis of organic one-dimensional nanomaterials by solid-phase reaction, *J. Am. Chem. Soc.* 125 (36) (2003) 10794–10795.
- [56] K.-S. Lin, S. Chowdhury, Synthesis, characterization, and application of 1-D cerium oxide nanomaterials : a review, *Int. J. Mol. Sci.* 11 (9) (2010) 3226–3251.
- [57] N.R. Savadekar, S.T. Mhaske, Synthesis of nano cellulose fibers and effect on thermo- plastics starch based films, *Carbohydr. Polym.* 89 (1) (2012) 146–151.
- [58] M. Sathishkumar, K. Sneha, S.W. Won, C.-W. Cho, S. Kim, Y.-S. Yun, Cinnamon zeylanicum bark extract and powder mediated green synthesis of nano-crystalline silver particles and its bactericidal activity, *Colloids Surf. B Biointerface.* 73 (2) (2009) 332–338.
- [59] H. Zhong, Y. Li, Y. Zhou, et al. Controlled synthesis of 3D nanostructured Cd₄Cl₃(OH)₅ templates and their transformation into Cd(OH)₂ and CdS nanomaterials, *Nanotechnology* 17 (3) (2006) 772–777.
- [60] L. Qie, W. Chen, H. Xu, et al. Synthesis of functionalized 3D hierarchical porous carbon for high-performance supercapacitors, *Energy Environ. Sci.* 6 (8) (2013) 2497.
- [61] X.W. Lou, Y. Wang, C. Yuan, J.Y. Lee, L.A. Archer, Template-free synthesis of SnO₂ hollow nanostructures with high lithium storage capacity, *Adv. Mater.* 18 (17) (2006) 2325–2329.
- [62] X. Cao, Y. Shi, W. Shi, et al. Preparation of novel 3D graphene networks for super- capacitor applications, *Small* 7 (22) (2011) 3163–3168.

- [63] H. Munekata, H. Ohno, S. von Molnar, A. Segmüller, L. L. Chang, and L. Esaki. Diluted magnetic III-V semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :1849–1852, 1989.
- [64] J. K. Furdyna. Diluted magnetic semiconductors. *J. Appl. Phys.*, 64(4) :R29–R64, 1988.
- [65] H. Ohno. Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic. *Science*, 281 :951–956, 1998.
- [66] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, and Y. Iye. (Ga,Mn)As : A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. *Appl. Phys. Lett.*, 69(3) :363–365, 1996.
- [67] Y. Y. Fein, A. Shayeghi, L. Mairhofer, F. Kiałka, P. Rieser, P. Geyer, S. Gerlich, and M. Arndt, “Quantum-assisted measurement of atomic diamagnetism,” *Physical Review X*, vol. 10, no. 1, p. 011014, 2020.
- [68] R. Bjørk, C. R. H. Bahl, A. Smith, D. Christensen, and N. Pryds, “An optimized magnet for magnetic refrigeration,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 322, no. 21, pp. 3324–3328, 2010.
- [69] V. A. Gubanov, A. I. Liechtenstein, and A. V. Postnikov, *Magnetism and the electronic structure of crystals*, vol. 98. Springer Science and Business Media, 2012.
- [70] L. Mañosa, A. Planes, and M. Acet, “Advanced materials for solid-state refrigeration,” *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 1, no. 16, pp. 4925–4936, 2013.
- [71] A. H. El-Sayed and M. A. Hamad, “Simulated hysteretic loops for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 31, no. 10, pp. 3163–3166, 2018.
- [72] K. Rechcińska, The spin-orbit interaction of light in tunable liquid crystal microcavities, (2023).
- [73] R. Winkler. Spin orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003.

- [74] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc-blende structures. *Phys. Rev.*, 100 :580, 1955.
- [75] E. Rashba, “Symmetry of energy bands in crystals of wurtzite type. 1. symmetry of bands disregarding spin-orbit interaction,” *Soviet Physics-Solid State*, vol. 1, no. 3, pp. 368–380, 1959.
- [76] E. I. Rashba and V. I. Sheka, “Simmetriya energeticheskikh zon v kristallakh tipa vyurtsita. II. Simmetriya zon s uchyotom spinovykh vzaimodeistvii,” *Fiz. Tverd. Tela : Collected Papers*, vol. 2, pp. 162–176, 1959. [English translation : Supplemental Material to the paper by G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, Focus on the Rashba effect, *New J. Phys.* 17, 050202 (2015)].
- [77] F. Vas’ko, “Spin splitting in the spectrum of two-dimensional electrons due to the surface potential,” *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. 30, p. 541, 1979.
- [78] Y. A. Bychkov and E. Rashba, “Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy,” *JETP Lett.*, vol. 39, p. 78, 1984. [*Pis’ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 39, 66 (1984)].
- [79] M. Germain, E. Kartheuser, A. L. Gurskii, E. V. Lutsenko, I. P. Marko, V.N. Pavlovskii, and B. Schineller, *J. Appl. Phys.*, **91**, 9827(2002).
- [80] M. Ziesmann, D. Heitmann, and L. L. Chang, *Phys. Rev. B*, **35**, 4541 (1987).
- [81] M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, M. S. Shur, John Wiley and Sons, New York (2001)
- [82] B. Santic, *Semicond. Sci. Technol.*, **18**, 219(2003).
- [83] L. Xi-Xia, and B. Shi-Liang. *Chinese Physics*, **13**, 71, (2004).
- [84] M. Solaimani, L. Lavaei, and S. M. A. Aleomraninejad. *JOSA B*, **34**, 1989-1993(2017).
- [85] S. Baskoutas, A. F. Terzis, W. Schommers, *J. Comp. and Theor. Nanosc.*, **3**, 269(2006)

- [86] P. Hosseinpour, J. Barvestani, A. S. Vala, *Physica Scripta*, **91**, 045803(2016)
- [87] K. Feddi, M. Kria, M. El-Yadri, F. C. Fobasso Mbognou, G. Long, A. Tiutiunnyk, L. M. Pérez, D. Laroze, and E. Feddi, *Physica Scripta*, **95**, 105706. (2020).
- [88] M. König et al, Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, *Science*, **318** (2007) 766-770. DOI : 10.1126/science.1148047.
- [89] J. Sinova et al, Universal intrinsic spin Hall effect, *Phys. Rev. Lett.*, **92** (2004) 126603 (4 pp). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.126603>.
- [90] C.M. Lee, C.C. Lam, S.W. Gu, Low-lying energy spectrum of a magnetopolaron bound to a Coulomb impurity in a quantum dot, *Solid state communications*, **112** (1999) 555-560. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(99\)00398-1](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(99)00398-1).
- [91] C.M. Lee, S.W. Gu, Polaron effect on energy spectrum in two-electron quantum dot under magnetic field, *Solid state communications*, **116**, (2000) 51-56. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(00\)00279-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(00)00279-9).
- [92] R. Khordad, B. Vaseghi, Magnetic properties in three electrons under Rashba spin orbit interaction and magnetic field, *Int. J. Quant. Chem.*, **119** (2019) e25994(10 pages). <https://doi.org/10.1002/qua.25994>.
- [93] H. Hassanabadi, H. Rahimov, S. Zarrinkamar,[HTML] Rashba coupling in three electron-quantum dot under cylindrical symmetry : An exact solution, *Ann. Phys.*, **326** (2011) 2957-2962. <https://doi.org/10.1016/j.aop.2011.07.011>.
- [94] C.M. Lee, Polaron effect on the low-lying states of a three electron quantum dot in a magnetic field, *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 4661-4665. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.4661>.
- [95] H. Fröhlich, et al., XX. Properties of slow electrons in polar materials, *Phil. Mag.*, **41** (1950) 221-242. <https://doi.org/10.1080/14786445008521794>.
- [96] R.P. Feynman, Slow electrons in a polar crystal, *Phys. Rev.*, **97** (1955) 660-665. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.97.660>.

- [97] H. Hassanabadi, M. Solaimani, H. Rahimov, Rashba coupling in three-electron-quantum dot : A numerical solution, *Solid State Commun.*, **151** (2011) 1962-1967. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2011.09.009>.
- [98] H. Hassanabadi, H. Rahimov, and S. Zarrinkamar, Analytical Treatment of a Three Electron Quantum Dot Under Rashba Spin Orbit Interaction, *Few Body Systems*, **52** (2012) 87-95. <https://doi.org/10.1007/s00601-011-0234-9>.
- [99] H. Hassanabadi, M. Hamzavi, S. Zarrinkamar, and A.A. Rajabi, Quadratic and coulomb terms for the spectrum of a three-electron quantum dot, *Few-Body Systems*, **48** (2010) 53-58. <https://doi.org/10.1007/s00601-010-0092-x>.
- [100] W. Xie, Polaron effects on linear and nonlinear optical properties of a two-electron quantum dot, *Physica B : Condensed Matter*, **406** (2011) 1805-1808. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.02.032>.
- [101] L. Xi Xia, and B. Shi Liang, Optical vibration modes and electron phonon interaction in ternary mixed crystals of polar semiconductors, *Chin. Phys.*, **13** (2004) 71-81. DOI 10.1088/1009-1963/13/1/014.
- [102] H. Fröhlich, et al., *Phil. Mag.* **41** 221 (1950).
- [103] C. S. Kim and O. Olendski, *Physical Review B*, **53**(19), 12917 (1996).
- [104] F. Y. Wang, *Physics with Maple*, John Wiley and Sons (2008).
- [105] R. Lang, A. Winter, H. Pascher, H. Krenn, X. Liu, and J. K. Furdyna, *Physical Review B*, **72**(2), 024430 (2005).
- [106] S. Ohya, K. Takata, and M. Tanaka, *Nature Physics*, **7**(4), 342-347 (2011).
- [107] C. P. Weber, E. A. Kittlaus, K. B. Mattia, C. J. Waight, J. Hagmann, X. Liu and J. K. Furdyna, *Applied Physics Letters*, **102**(18), 182402 (2013).
- [108] V. A. Kulbachinskii and L. Y. Shchurova, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **109**(1), 117-127 (2009).
- [109] H. Holmberg, N. Lebedeva, S. Novikov, P. Kuivalainen, M. Malfait and V. V. Moshchalkov, *physica status solidi (a)*, **204**(3), 791-804 (2007).

- [110] J. Wang, B. Lv, H. Mao, Q. Zhao, J. Yu, Y. Liu, ... and H. Xing, Applied Physics Letters, **91**(5), 052509 (2007).
- [111] A. M. Nazmul, S. Sugahara, and M. Tanaka, Physical Review B, **67**(24), 241308 (2003).
- [112] J.S. Helton et al., Phys. Rev. Lett. 104, 147201 (2010).
- [113] K. Z. Rushchanskii, S. Kamba, V. Goian, P. Vaněk, M. Savinov, J. Prokleška, ... and N. A. Spaldin, Nature materials, **9**(8), 649-654 (2010).
- [114] V. R. Shaginyan, A. Z. Msezane, and K.G. Popov, Physical Review B, **84**(6), 060401 (2011).
- [115] B. Sahu and A. M. Strydom, arXiv preprint arXiv :2109.09632 (2021). **
[https ://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.168444](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.168444)
- [116] H. Zhang, Y. J. Sun, E. Niu, L. H. Yang, J. Shen, F. X. Hu, ... and B. G. Shen, Applied Physics Letters, **103**(20), 202412 (2013).
- [117] M. Evangelisti, F. Luis, L. J. De Jongh and M. Affronte, Journal of Materials Chemistry, **16**(26), 2534-2549 (2006).
- [118] O. Olendski, C. S. Kim, O. H. Chung and C. S. Lee, Physical Review B, **55**(15), 9834 (1997).

List of publications

1. **K. Lakaal**, L.M. Pérez, M. Kria, J. El Hamdaoui, C. O. Edet, V. Prasad, ... and E. Feddi. Effects of electron–phonon coupling and Rashba spin–orbit interaction on thermodynamic and magnetic properties of quantum dots. Chinese Journal of Physics, **2024**, 89, 390-403. (IF : 4.6), <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.045>

2. **K. Lakaal**, M. Kria, J. El Hamdaoui, Varsha, V. Prasad, Vijit V. Nautiyal, M. El-Yadri, L.M. Pérez, D. Laroze, E. Feddi. “Polaronic corrections on magnetization and thermodynamic properties of electron-electron in 2D systems with Rashba spin-orbit coupling”. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **2022**, 551, 169042. (IF : 3.09), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169042>

3. J. El hamdaoui ; **K. Lakaal** ; D. Mazkad ; M. Beraich ; A. El Fatimy ; M. Courel ; L.M. Pérez ; Pablo Díaz ; D. Laroze ; E. Feddi. “First principles study on electronic and optical properties of Cu₂CoGeS₄ for photovoltaic conversion and photocatalytic applications“. Materials Research Bulletin, **2023**, 165, 112235 (IF : 5.6), <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2023.112235>

4. C. O. Edet, **K. Lakaal**, J. El Hamdaoui, K. Feddi, L. M. Pérez, E. Feddi, ... and M. Asjad. “Investigating the magneto-transport and thermal properties of 2D electron systems under the influence of the Aharonov–Bohm field and Eckart potential interaction“, Physica B Condensed Matter, **2024**, 673, 415438. (IF : 2.8), <https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415438>

5. Varsha, **K. Lakaal**, M. Kria, J. El Hamdaoui, V. Prasad, E. Feddi, D. Laroze, L. M. Pérez, M. E. Mora Ramos.' Lattice deformation and potential effects on linear and nonlinear optical properties of doped SiGe quantum dot encapsulated in Si matrix', The European Physical Journal Plus, **2023** 137,1340 (**IF 3.758**), <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03530-9>

6. **K. Lakaal**, E. Feddi, L. M. Pérez. "Influence of Hole–Phonon Coupling on Magneto–Transport and Magnetocaloric Properties of the Dilute Ferromagnetic Semiconductor $Ga_{1-x}Mn_xAs$ in Confined Systems". Mater. Proc, **2023**, 14, 0.

7. J. El Hamdaoui, M. El-Yadri, **K. Lakaal**, M. Kria, M. Courel, M. Ojeda, L.M. Pérez, D. Laroze, E. Feddi. "Ab initio study on electronic and optical properties of Cu_2NiGeS_4 for photovoltaic applications". Solar energy, **2022**, 237, 333–339. (**IF : 7.18**), <https://doi.org/10.1016/j.solener.2022.03.052>

8. J. El Hamdaoui, M. Kria, **K. Lakaal**, M. El-Yadri, E. Feddi, L. Pedraja Rejas, L. M. Pérez, P. Díaz, M. E Mora-Ramos, D. Laroze. "Ab Initio Study of Carrier Mobility, Thermodynamic and Thermoelectric Properties of Kesterite Cu_2ZnGeS_4 ". International Journal of Molecular Sciences. **2022**, 23, 12785. (**IF : 6.02**), <https://doi.org/10.3390/ijms232112785>

9. M. Kria., V. V. Nautiyal, **K. Lakaal**, J. El Hamdaoui, L. M. Pérez, D. Laroze, E. Feddi. "Rashba effect on linear and nonlinear optical properties of a cylindrical core/shell heterojunction quantum dot". Frontiers in Physics, **2022** 669.(**IF : 3.56**), <https://doi.org/10.3389/fphy.2022.942758>

10. Varsha, M. Kria, V. V. Nautiyal, **K. Lakaal**, D. Laroze, L. M. Pérez, V. Prasad, and E. Feddi. "Optical properties of donor impurity in Yukawa like potential : application to SiGe/Si and Si/SiGe", Physica Scripta, **2023**, 98(5), 055914. (**IF : 2.6**), [10.1088/1402-4896/acc7d5](https://doi.org/10.1088/1402-4896/acc7d5)

Magneto-Transport and Magnetocaloric Properties of Highly Doped (Ga,Mn)As DMS Confined Systems.

K. Lakaal,¹ L. M. Pérez,² V. Prasad,³ D. Laroze,⁴ V. Chaudhary,⁵
W. J. Pasek,⁵ A. En Naciri,⁶ A. El Fatimy,⁵ and E. Feddi^{5,*}

¹Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials,
ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco

²Departamento de Ingeniería Industrial y de Sistemas,
Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

³Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, Delhi-110036, India

⁴Instituto de Alta Investigación, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica 1000000, Chile

⁵School of Applied and Engineering Physics, Mohammed VI Polytechnic University,
Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir, 43150, Morocco

⁶LCP-A2MC, Université de Lorraine, ICPM, 1 Bd Arago, 57070 Metz, France

(Dated: January 4, 2025)

The magneto-transport and magnetocaloric properties of interacting holes in highly doped (Ga,Mn)As diluted magnetic semiconductor (DMS) are studied, including the longitudinal-optical-phonon interactions under the temperature and magnetic field variation ranging from 0 K to 50 K and -5 to 5 T, respectively. The energy levels of two interacting hole states have been obtained by solving the Schrödinger's equation, and all thermodynamic functions are derived using the Boltzmann-Gibbs statistical framework. The formalism and numerical calculation are applied to $(\text{Ga}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{As})$ containing 3% Mn. The behavior of magnetic susceptibility reveals that anti-ferromagnetic interaction is associated with ferromagnetic order in (Ga,Mn)As under certain conditions. Additionally, Both the adiabatic temperature change (ΔT_{ad}) and the magnetic entropy change (ΔS_M) are calculated. The minimum of magnetic entropy change ($\Delta S_M/K_B$) is found to increase linearly with applied magnetic field and provides -0.54 for the field value of 2 T. In addition, the persistent current in the presence of magnetic fields is also investigated considering the role of the hole-hole interactions. Our calculations highlight two interesting results: a substantial reduction in the current results from an increase in the magnetic field at low temperatures on the one hand, and on the other hand, the interaction between holes induces an increase in the overall amplitude of the current.

Keywords: Spintronics, antiferromagnetic, diluted magnetic semiconductors, magnetization, magnetic susceptibility, persistent current.

I. INTRODUCTION

Nowadays, quantum electronics has witnessed significant attention due to the development of novel semiconducting materials and advanced fabrication techniques.[1–3] These novel materials with both magnetic and semiconducting properties in confined system could provide the possibility of using electron spins in electronic devices for the processing, transferring, and storing of information as future technology.[4] The spin effects are not exploited in conventional semiconductor electronic devices. The most used integrated circuits employ nonmagnetic materials such as Si, Ge, and GaAs, where the energy of charge carriers is independent of the spin states. However, it was demonstrated that the devices working with both the electrical and spin properties (spintronic devices) allow the development of new optoelectronic devices having fascinating properties.[5] Indeed, compared to the motion of the charge carriers (electrons and holes), the spin can be switched quickly between two states; thus, spintronic components are ex-

pected to work faster without heating losses in comparison to that of than current electronics. This concept has led to the development of several novel devices such as giant magneto-resistance sensors, spin-polarised transistors, spin-polarised light emissions, magnetic tunnel junctions, spin-transfer torque, and spin Hall effect, etc., with enhanced functionalities.[5–9]

However, the fabrication of these devices for future electronics requires the materials having spintronic properties. Numerous classes of materials such as half-metallic ferromagnets (CrO_2), spinels (Fe_3O_4), perovskites [$(\text{La},\text{Sr})\text{MnO}_3$], magnetic semiconductors (EuO , EuS , $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ and CrAs), heusler alloys (NiMnSb), perpendicularly anisotropic materials ($\text{CoFeB}/\text{MgO}/\text{CoFeB}$), and antiferromagnetic materials, etc., have been explored for spintronic and next generation information technology devices.[10] On the other hand, doping with magnetic impurities provides another way to obtain semiconductors with spintronic properties. In group II-VI semiconductors, where the cation's valence band coincides with the valence band of magnetic ions (Mn,Cr), the antiferromagnetic interactions with very low Curie temperature are fundamental.[11] Additionally, the Mn doped group III-V semiconductors – so-

* Corresponding Author: e.feddi@um5r.ac.ma

Journal Pre-proof

Effects of electron–phonon coupling and Rashba spin–orbit interaction on thermodynamic and magnetic properties of quantum dots

K. Lakaal, L.M. Pérez, M. Kria, J. El Hamdaoui, C.O. Edet, V. Prasad, D. Laroze, E. Feddi



PII: S0577-9073(23)00228-9
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.045>
Reference: CJPH 2280

To appear in: *Chinese Journal of Physics*

Received date: 4 October 2022
Revised date: 26 October 2023
Accepted date: 30 October 2023

Please cite this article as: K. Lakaal, L.M. Pérez, M. Kria et al., Effects of electron–phonon coupling and Rashba spin–orbit interaction on thermodynamic and magnetic properties of quantum dots, *Chinese Journal of Physics* (2023), doi: <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.045>.

This is a PDF file of an article that has undergone enhancements after acceptance, such as the addition of a cover page and metadata, and formatting for readability, but it is not yet the definitive version of record. This version will undergo additional copyediting, typesetting and review before it is published in its final form, but we are providing this version to give early visibility of the article. Please note that, during the production process, errors may be discovered which could affect the content, and all legal disclaimers that apply to the journal pertain.

© 2023 The Physical Society of the Republic of China (Taiwan). Published by Elsevier B.V. All rights reserved.

Research articles

Polaronic corrections on magnetization and thermodynamic properties of electron–electron in 2D systems with Rashba spin–orbit coupling

K. Lakaal^a, M. Kria^a, J. El Hamdaoui^a, Varsha^{b,c}, V. Prasad^d, Vijit V. Nautiyal^b, M. El-Yadri^a, L.M. Pérez^{e,*}, D. Laroze^f, E. Feddi^{a,**}

^a Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Rabat 10100, Morocco

^b Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi 110007, India

^c Department of Physics, Kalindi College, University of Delhi, Delhi 110008, India

^d Department of Physics, Swami Shradhdhanand College, University of Delhi, Delhi 110036, India

^e Departamento de Física, FACL, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica 1000000, Chile

^f Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica 1000000, Chile

ARTICLE INFO

Keywords:

Rashba spin–orbit interaction
 Electron–phonon coupling
 Susceptibility
 Heat capacity
 Entropy
 Quantum dots

ABSTRACT

Magnetic and thermodynamic properties of two electron system confined in 2-D quantum structures submitted to an applied magnetic field are studied taking into account the spin–orbit and electron–phonon interactions. The confinement is considered as a harmonic potential and the electron–electron interaction is taken as coulombic. We have first solved the Schrödinger equation to obtain energy levels and then obtain all the thermodynamic functions using canonical ensemble. The numerical calculation of our formalism is applied essentially for the GaN and InAs which are (III–V) compounds. Our results show that even at $B = 0$ T, the susceptibility of GaN shows diamagnetic behavior for all temperatures. However, with an increase in the magnetic field, susceptibility increases and the system shows paramagnetic behavior for both cases associated with and without polaron effect. We demonstrate that taking into account the Rashba spin–orbit interaction leads to a shift of the cutoff magnetic field B_c (value of B for which the magnetic nature of the dot changes from diamagnetic to paramagnetic) to the higher magnetic field with an increase in temperature. We also show that by taking into account the polaronic effect, Rashba spin–orbit interaction lowers the mean energy of the system. The heat capacity curve shows a peak at a low temperature (Schottky anomaly) and shifts toward high temperature with an increase in confinement and magnetic field strength. The consideration of the polaron effect shifts the heat capacity curve to lower temperatures.

1. Introduction

Recently, the progress and the mastery of the phenomena related to the spin and its interaction with the electronic system motion will certainly open the way to new applications in the spintronic area. Nowadays, spin-based nanodevices for optoelectronic applications and quantum transport constitute a challenging area for many researchers [1]. Based on the spin character instead of the charge carriers (electron and hole), this emerging field of spintronic devices use as a principle the interaction of the spin motion with the carrier orbits in semiconductor nanomaterials known as spin–orbit interaction (SOI) [2–5]. This concept is really impressive in confined systems and leads to more possibilities to discover other extraordinary non-conventional properties both in optoelectronic and in transport phenomena such as

Qbit for memory and computing, coding the information, spin field-effect transistors, spin switch, spin LED, spin batteries, and many others devices [6].

Strictly speaking, the concept of spin–orbit interaction (SOI) can be considered as the result of the collective behavior of charge carriers and spin in asymmetrical systems. This coupling can occur through two situations: The first one corresponds to the Dresselhaus SOI (DSOI) induced in the case of bulk inversion asymmetry which corresponds to non-centrosymmetric crystal growth as in III–V and II–VI Zinc Blend and Wurtzite crystal structures [7]. The second situation is known as Rashba SOI (RSOI) takes place only in low dimensional structures and is caused by the asymmetry during the growth process especially in the heterostructure or by an external perturbation [8]. These two effects cause important changes in the optoelectronic, thermodynamic and

* Corresponding author.

** Corresponding author.

E-mail addresses: lperez@uta.cl (L.M. Pérez), e.feddi@um5s.net.ma (E. Feddi).



Research Papers

First principles study on electronic and optical properties of $\text{Cu}_2\text{CoGeS}_4$ for photovoltaic conversion and photocatalytic applicationsJ. El hamdaoui^{a,b}, K. Lakaal^{a,b}, D. Mazkad^c, M. Beraich^d, A. El Fatimy^e, M. Courel^f, L.M. Pérez^{g,**}, Pablo Díaz^h, D. Larozeⁱ, E. Feddi^{a,e,*}^a Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco^b Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCSd), Faculty of Sciences Rabat, Mohammed V University in Rabat, Morocco^c Laboratory of Spectroscopy, Molecular Modeling, Materials, Nanomaterials, Water and Environment, Materials for Environment Team, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco^d Laboratory of Materials, Energy and the Environment (LaMEE), Faculty of Science Semlalia, Cadi Ayyad University, P. O. Box 2390, Marrakech 40000, Morocco^e Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir, 43150, Morocco^f Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de los Valles (CUValles), Ameca, Jalisco, México^g Departamento de Física, FACL, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile^h Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco 4780000, Chileⁱ Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

ARTICLE INFO

Keywords:

Kesterite

CCGS

Electronic properties

Optical properties

Solar cell

ABSTRACT

In this study, the structural, electrical, and optical characteristics of the Stannite $\text{Cu}_2\text{CoGeS}_4$ (CCGS) are investigated using first-principle calculations. Band gap energy is determined using both the mBJ + U and HSE potentials. Both methods yield to similar results (1.73 eV and 1.78 eV for the first and second, respectively and 1.78 eV for the first and second, respectively). Based on our numerical simulations, CCGS is a viable absorber material for solar systems due to its exceptionally high absorption coefficient (on the order of 10^4 cm^{-1}). This work also determines other optical parameters such as the refraction index and the dielectric function. In addition, the SCAPS program was used to conduct a simulation of solar cells based on CCGS. Based on the computed values of the short-circuit current density J_{sc} , open-circuit voltage V_{oc} , Fill factor FF, and power conversion efficiency, CCGS is presented as a good choice for solar cells. We also explored the potential of CCGS for photocatalytic water splitting.

1. Introduction

The growing energy demand and the need for sustainable energy sources have led to an increased interest in the development of solar cells as a potential solution. Thin film solar cells, in particular, have gained attention due to their potential for low-cost production and high efficiency [1]. However, the selection of suitable absorber materials in thin film solar cells is a challenging task, as several factors such as the absorption coefficient, band gap value, cost of production, stability, non-toxicity, and ease of fabrication must be considered [2].

$\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) quaternary compound has emerged as a promising absorber material in recent years due to its ease of fabrication and excellent properties [3]. This material has a p-type conductivity and absorption coefficient of more than 10^5 cm^{-1} with an optimal and direct

band gap transition of 1.5 eV, allowing visible light absorption [4,5].

To address these limitations, new quaternary compounds Cu_2MnS_4 have attracted the attention of researchers. The general idea consists of the partial or total substitution of the Zn^{2+} by M^{2+} ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$, or Mn) and Sn^{4+} by $\text{N}^{4+} = \text{Ge}^{4+}$ [4,6–8]. These new quaternary materials crystallize in a tetragonal kesterite (I4 space group) or tetragonal stannite (I42m space group) system [6,8]. They have interesting properties similar to those of CZTS [9,10].

One of these new compounds is $\text{Cu}_2\text{CoGeS}_4$ (CCGS), a tetragonal stannite material. Despite its potential application, the improvement of its efficiency and the understanding of this type of cell remain relatively limited compared to CIGS and CdTe solar cells. CCGS has a direct transition with a wide optical range (1.4 eV to 2.2 eV) [11–13], making

* Corresponding author at: Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco.

** Corresponding author.

E-mail addresses: lperez@uta.cl (L.M. Pérez), e.feddi@um5s.net.ma (E. Feddi).

Investigating the magneto-transport and thermal properties of 2D electron systems under the influence of the Aharonov–Bohm field and Eckart potential interaction

C.O. Edet^{a,b,c}, K. Lakaal^{d,*}, J. El Hamdaoui^d, K. Feddi^{e,f}, L.M. Pérez^g, E. Feddi^{d,h}, A.N. Ikotⁱ, N. Ali^{j,b}, Shamsul Amir Abdul Rais^b, M. Asjad^k

^a Institute of Engineering Mathematics, Universiti Malaysia Perlis, 02600 Arau, Perlis, Malaysia

^b Faculty of Electronic Engineering Technology, Universiti Malaysia Perlis, Malaysia

^c Department of Physics, Cross River University of Technology, Calabar, Nigeria

^d Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Rabat 10100, Morocco

^e EIMIS Laboratory, FST, University Abdelmalek Essadi, Tanger, Morocco

^f Renewable Energy and Advanced Materials Laboratory, International University of Rabat, Morocco

^g Departamento de Física, FACL, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica 1000000, Chile

^h Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir 43150, Morocco

ⁱ Theoretical Physics Group, Department of Physics, University of Port Harcourt, Nigeria

^j Advanced Communication Engineering (ACE) Centre of Excellence, Universiti Malaysia Perlis, 01000 Kangar, Perlis, Malaysia

^k Department of Mathematics, Khalifa University, Abu Dhabi 127788, United Arab Emirates

ARTICLE INFO

Keywords:

Schrödinger equation

Eckart potential

Magnetic field

Aharonov–Bohm field

ABSTRACT

The Eckart potential is a well-known potential model with applications cutting across chemical physics and related areas. It is often used to evaluate quantum mechanical tunneling corrections in order to obtain chemical rate constants. To this end, this study focused on extensively examining the effects of perturbations on the magnetic and thermal properties of Eckart potential. In the presence of magnetic and Aharonov–Bohm fields with Eckart potential, the Schrödinger equation is solved using the functional analysis approach (FAA). The energy equation and wave function are obtained analytically. The energy equation is used to derive expressions for the thermo-magnetic properties of the Eckart potential. An extensive examination of the effect of these fields and potential parameters on the wave function is graphically presented. In numerous configurations of the analysis, we can observe that the diamagnetic behavior shown by the system and the specific heat capacity agree with the Dulong–Petit law. The results of this study are valuable in areas such as molecular physics and condensed matter physics, amongst others.

1. Introduction

In the past ten decades, many potential functions have been used to model the interactions in a physical system [1–5]. Depending on the nature of the interaction, these potential functions can present in various forms [5–7]. When the historical harmonic oscillator was proven to be inadequate, several improvements to the aforementioned models have been made, like Morse potential, the Gaussian potential and other potentials [8–10]. In order to study these interactions, usually the Schrödinger equation (SE) or any other applicable relativistic equation is solved in the presence of said interaction potentials using numerous mathematical models [3,11–15]. One of the potentials that have been explored is the Eckart potential (EP) detailed in the next

section, which is used to carry out many relativistic and non-relativistic quantum mechanical treatments [16–29].

In their study, Johnston and Heicklen [30] computed the tunneling corrections pertaining to the unsymmetrical Eckart potential within the parameter ranges anticipated for typical chemical reactions occurring at ambient temperatures. Brown [31] showed in his seminal paper a novel approach for the straightforward calculation of tunneling corrections for unsymmetrical Eckart-type potential barriers. Brown [31] (and the citations therein) have pointed out that the Eckart potential function is usually used to evaluate quantum mechanical tunneling corrections to chemical rate constants, which are theoretically determined.

* Corresponding author.

E-mail addresses: collinsokonedet@gmail.com (C.O. Edet), kamal.lakaal@gmail.com (K. Lakaal).



Lattice deformation and potential effects on linear and nonlinear optical properties of doped SiGe quantum dot encapsulated in Si matrix

Varsha^{1,2}, K. Lakaal^{3,4}, M. Kria^{3,4}, J. El Hamdaoui^{3,4}, V. Prasad^{5,a}, E. Feddi^{3,6}, D. Laroze⁷, L. M. Pérez⁸, M. E. Mora Ramos^{9,b}

¹ Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi 110007, India

² Department of Physics, Kalindi College, University of Delhi, Delhi 110008, India

³ Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco

⁴ Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCScI), Faculty of Sciences Rabat, Mohammed V University in Rabat, Morocco V University in Rabat, Rabat, Morocco

⁵ Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, Delhi 110036, India

⁶ Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid, Ben Guerir 43150, Morocco

⁷ Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica, Chile

⁸ Departamento de Física, FACY, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica, Chile

⁹ Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209 Cuernavaca, Morelos, Mexico

Received: 31 July 2022 / Accepted: 22 November 2022

© The Author(s), under exclusive licence to Società Italiana di Fisica and Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2022

Abstract Electron states in spheroid $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ quantum dots are investigated taking into account the presence of a donor impurity atom and a weak external electromagnetic laser field. The conduction band confining profile along the radial direction is modelled by a parameterized exponential potential. Based on the calculated inter-state transition energies, the nonlinear optical responses associated with light absorption, relative refractive index change, and second and third harmonics generation are evaluated and discussed. Results are reported considering different positions of the donor center in the dot as well as for different values of the exponential potential parameter. When the impurity is shifted to different position, the polarisation changes inside the dot and hence the energy and wave function of the system. The change of impurity position from center to edge of the dot causes redshift whereas the increase in potential parameter causes blueshift.

1 Introduction

Research and fabrication of optoelectronic devices underwent what may be called as a revolution after the proposal and development of semiconductor quantum dots (QDs) in 1980s [1, 2]. Progress on the subject has been reviewed in several occasions throughout the years [3–7]. Thanks to advanced epitaxial growth, beam lithography and reactive etching procedures, it has been possible to fabricate different kind of nanostructures with precise control of the wetting layer. Such a procedure is not exempt of technological challenges posed, in many cases, by the physical nature of the involved materials. Accordingly, lattice mismatch gives rise to strain, which conditions the geometry of obtained QD systems—with or without a wetting layer (WL)—as it has been revealed by accurate imaging. Thus, QD with cylindrical, conical, pyramidal, hemispherical, disc, lens, ring, dome, oblate (or semi-oblate) and prolate shapes have been dealt with either experimentally or from the theoretical point of view [8–17].

SiGe/Si QDs have attracted attention not only due to their optical properties, such as photoluminescence in the visible range [18], but also mostly in relation with their promising features with regard to qubit hosting, pointing at core applications for quantum computing [19–26]. The field of nonlinear optics is growing due to its vast applications like second harmonic generation, third harmonic generation, etc. [27] The nonlinear response of the hetero-structure arises in the anisotropic medium where the polarization is expressed as a power series where the contribution from nonlinear terms arises only when the field strength of the applied field is high. These effects were observed after the invention of the laser which is a highly coherent source of high intensity so the contribution of the nonlinear terms increases. Here, we investigate SiGe/Si QDs from the perspective of their nonlinear optical response. In particular, we assume the presence of ionized, hydrogenic-like, impurity atom and model the electron confinement with an attractive power exponential potential function. In this way, we theoretically evaluate the coefficients of optical absorption, relative refractive index change, second harmonics generation (SHG), and third harmonics generation (THG); all of them are related with transitions between allowed electron states in the system, influenced by the electrostatic interaction with the Coulombic center.

^a e-mail: vprasad@ss.du.ac.in (corresponding author)

^b e-mail: memora@uaem.mx

Influence of Hole-Phonon Coupling on Magneto–Transport and Magnetocaloric Properties of the Dilute Ferromagnetic Semiconductor $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ in Confined Systems [†]

Kamal Lakaal ^{1,2} , El Mustapha Feddi ^{2,3*}  and L. M. Pérez ⁴

¹ Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCScl), Faculty of Sciences Rabat, Mohammed V University in Rabat, Morocco

² Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco

³ Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Mohammadia, 13112, BP 7658, Morocco

⁴ Departamento de Física, FACL, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica 1000000, Chile

* Correspondence: e.feddi@um5r.ac.ma

[†] Presented at the 4th International Online Conference on Nanomaterials; Available online: <https://iocn2023.sciforum.net>.

Abstract: In this work the thermodynamic and magnetic properties of a two-holes parabolic quantum dot are studied in the presence of hole-hole and hole-phonon interactions in the range of temperature from 0 K to 50 K and in magnetic fields varying from -5 to 5 T. Calculations of energy levels of two-holes states have been performed with a resolution of the Schrödinger's equation and all thermodynamic functions are derived by using the canonical ensemble. Our formalism's numerical calculation is essentially applied to dilute ferromagnetic semiconductors $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ containing 3% Mn. The founded results show that the magnetic and thermodynamic properties are influenced by the magnetic field, hole-phonon and hole-hole interactions, and the confinement. The analysis of magnetization and susceptibility justifies that The $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ quantum dots with 3% Mn content are ferromagnetically even in the absence of a magnetic field, and show the antiferromagnetic behaviour under certain conditions. This results are similar with the majority of the previous works.

Keywords: Hole–Phonon Interaction; Diluted Magnetic Semiconductors; Magnetic Susceptibility



Citation: Lakaal, K.; Feddi, E.M.; Pérez, L.M. Influence of Hole-Phonon Coupling on Magneto–Transport and Magnetocaloric Properties of the Dilute Ferromagnetic Semiconductor $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ in Confined Systems. *Mater. Proc.* **2023**, *14*, 0. <https://doi.org/>

Academic Editor: Name

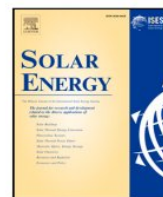
Published: 5 May 2023



Copyright: © 2023 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

2. Introduction

With the development of experimental techniques along with the theoretical understanding of the subject of spintronics and other related areas, the manipulation of quantum dots with the external magnetic, electric, and electromagnetic fields have gained a lot of prominence in recent times. The surge of the articles coming in literature is an Indicator of the importance of such studies [1–5]. It is also interesting to note that as far as Quantum heterostructures such as quantum wells, wires, and dots are concerned, applications based on electron states have been dominating the studies. Strange enough that applicationbased hole states of such quantum systems have received less attention. One possible reason for it may be slow mobility of holes compared to the electrons in confinement. Due to slow mobility, devices based on higher power consumption may lead lesser commercial demands. Also, higher input powers or fields may shorten lives of such devices. Despite these possible reasons, study of two (multiple) hole quantum devices is very interesting. As in the case of two electron systems, the Coulombic interaction between electrons under confinement remains dominant and plays an important part, while determining the energy states, matrix elements, and the modification of wave functions. More or less, hole-hole interaction plays the same role. The hole states in quantum wells, wires and dots are now slowly gaining interest in the recent times. As holes have strong spin-orbit coupling



Ab initio study on electronic and optical properties of $\text{Cu}_2\text{NiGeS}_4$ for photovoltaic applications

J. El Hamdaoui^{a,b}, M. El-Yadri^a, K. Lakaal^{a,b}, M. Kria^{a,b}, M. Courel^c, M. Ojeda^c, L.M. Pérez^{d,*}, D. Laroze^e, E. Feddi^{a,f,*}

^a Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco

^b Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCSi), Faculty of Sciences Rabat, Mohammed V University in Rabat, Morocco

^c Centro Universitario de los Valles, Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca, 46600, Ameca, Jalisco, Mexico

^d Departamento de Física, FACL, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

^e Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

^f Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir, 43150, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Kesterite

CNGS

Electronic properties

Optical properties

Solar cell

ABSTRACT

In this paper, first principle calculations of $\text{Cu}_2\text{NiGeS}_4$ (CNGS) are carried out to explore the structural, electronic and optical properties of kesterite compound. Both mBJ+U and HSE potentials are used to calculate the band gap energy. The first approach gives a value of 1.78 eV and the second one a value of 1.76 eV. Our numerical simulation shows that the CNGS exhibits a remarkable high absorption coefficient of the order of 10^4 cm^{-1} , leading to a promising absorber material for photovoltaic devices. Additional optical properties such as refraction index and dielectric function are also calculated in this work. Furthermore, CNGS-based solar cell simulation was performed through SCAPS software. The calculated values of short-circuit current density J_{sc} , open-circuit voltage V_{oc} , Fill factor FF and power conversion efficiency show that CNGS can be a potential candidate for solar cell application.

1. Introduction

Nowadays, one of the most important topics investigated by the scientific community is the generation of electrical energy through sources that are clean, safe, sustainable, renewable, and friendly to the environment (Razmjoo et al., 2021; Panwar et al., 2011). Due to this, a lot of theoretical and experimental research have been performed to understand and improve the process involved in the generation of electricity from the sunlight. As we know, the conversion efficiency from sunlight to electrical energy depends on the photovoltaic device that absorbs the radiation of the sunlight and converts it into electricity (Panwar et al., 2011; Beraich et al., 2020; Gloeckler and Sites, 2005).

Currently, photovoltaic materials such as amorphous silicon, CdTe, and chalcopyrite thin films have received a lot of interest because of their excellent optical properties and high PV efficiency (Ranjan et al., 2021; Ranjan and Chakraborty, 2021; Pham et al., 2021; Eid et al., 2015; Petrović et al., 2015; Ji et al., 2020). However, the majority of these materials contain low-abundance and/or toxic elements, restricting their use on a commercial basis. In particular, some studies have been performed in $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ (CZTSe), $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) and

$\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ compounds, which are an alternative for CIGS and CdTe. These three compounds present a kesterite symmetry and have been attracting attention because these materials are earth-abundant and nontoxic. However, the highest reported conversion efficiency is 12.6% even though the band gap is in the range from 1 to 1.5 eV (CZTSSe) with an absorption coefficient higher than 10^4 cm^{-1} (Dattatray and Abhishek, 2019; Delgado and Sagredo, 2020; Padhy et al., 2021; Kim et al., 2016). Therefore, its performance is still far from the 20.8% achieved for CIGSe thin film solar cells (Eid et al., 2015). The main drawbacks in the power conversion performance of kesterite-based thin film solar cell are the presence of secondary phases such as ZnS, SnS, SnS_2 , and Cu_2S , the presence of uncontrollable disorder, and the presence of large Cu_{Zn} and Zn_{Cu} antisite defects, leading to potential fluctuations in the electronic band structure and the band tailing (Just et al., 2016; Mangelis et al., 2019; Vanalakkar et al., 2018). One of the fascinating approaches to lessen these effects is to replace Cu^+ , Zn^{2+} , and Sn^{4+} with other chemical components of the same valence. The substitution of tin (Sn) atoms with germanium (Ge) atoms can increase the optical band gap, allowing it to be coupled with a low band-gap cell in a tandem configuration that can convert a significant part of

* Corresponding authors.

E-mail addresses: lperez@uta.cl (L.M. Pérez), e.feddi@um5s.net.ma (E. Feddi).

<https://doi.org/10.1016/j.solener.2022.03.052>

Received 24 January 2022; Received in revised form 18 March 2022; Accepted 19 March 2022

0038-092X/© 2022 International Solar Energy Society. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.



Article

Ab Initio Study of Carrier Mobility, Thermodynamic and Thermoelectric Properties of Kesterite $\text{Cu}_2\text{ZnGeS}_4$

Jawad El Hamdaoui ^{1,2}, Mohamed Kria ^{1,2}, Kamal Lakaal ^{1,2}, Mohamed El-Yadri ², El Mustapha Feddi ^{2,3}, Liliana Pedraja Rejas ⁴, Laura M. Pérez ^{5,*}, Pablo Díaz ⁶, Miguel E. Mora-Ramos ⁷ and David Laroze ^{8,*}

- ¹ Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCScl), Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Rabat 10100, Morocco
 - ² Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSET of Rabat, Mohammed V University in Rabat, Rabat 10100, Morocco
 - ³ Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir, Ben Guerir 43150, Morocco
 - ⁴ Departamento de Ingeniería Industrial y de Sistemas, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica 1000000, Chile
 - ⁵ Departamento de Física, FACH, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica 1000000, Chile
 - ⁶ Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco 4780000, Chile
 - ⁷ Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca 62209, Morelos, Mexico
 - ⁸ Instituto de Alta Investigación, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica 1000000, Chile
- * Correspondence: lperez@uta.cl (L.M.P.); dlaroze@uta.cl (D.L.)



Citation: El Hamdaoui, J.; Kria, M.; Lakaal, K.; El-Yadri, M.; Feddi, E.M.; Pedraja Rejas, L.; Pérez, L.M.; Díaz, P.; Mora-Ramos, M.E.; Laroze, D. Ab Initio Study of Carrier Mobility, Thermodynamic and Thermoelectric Properties of Kesterite $\text{Cu}_2\text{ZnGeS}_4$. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *23*, 12785. <https://doi.org/10.3390/ijms232112785>

Academic Editor: Mihai V. Putz

Received: 9 August 2022

Accepted: 18 September 2022

Published: 24 October 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract: The kesterite $\text{Cu}_2\text{ZnGeS}_4$ (CZGS) has recently gained significant interest in the scientific community. In this work, we investigated the thermodynamic and thermoelectric properties of CZGS by employing the first-principles calculation in association with the quasi-harmonic approximation, Boltzmann transport theory, deformation potential theory, and slack model. We obtained a bandgap of 2.05 eV and high carrier mobility. We found that CZGS exhibits adequate thermoelectric properties as a promising material for thermoelectric applications. The calculated Seebeck coefficient at room temperature is $149 \mu\text{V}\cdot\text{K}^{-1}$. We also determined the thermal and electrical conductivity, the power factor, and the figure of merit. In addition, the thermodynamic properties such as Debye temperature, entropy, and constant volume heat capacity are estimated. According to our results, it is concluded that the Slack model fails to provide correct values for lattice thermal conductivity in this material.

Keywords: thermoelectric; kesterite; DFT; CZGS; thermodynamic; mobility

1. Introduction

Quaternary kesterite compounds of the $\text{Cu}_2\text{ZnSn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{S}_4$ family have been under scrutiny for some time as suitable materials for photovoltaic applications [1]. Actually, they found application as top wide-gap absorbers in the fabrication of tandem solar cells [2,3]. In this sense, the particular $\text{Cu}_2\text{ZnGeS}_4$ semiconductor, with a band gap above 2 eV, could be a good top cell candidate top cell for achieving more than 25% of tandem device efficiency [4]. Additionally, the desirable non-toxic nature of these compounds involving earth-abundant constituents has also been emphasized [5]. Several reports on the practical realization of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{S}_4$ single crystals or thin films have appeared in recent years [5–11].

The electronic, structural, and optical properties of kesterite materials have been quite extensively investigated using first-principles calculations [12–17]. Utilizing numerical simulations and modeling is an interesting strategy for studying such properties. Modeling enables researchers to conduct theoretical studies on the general properties of materials [18–20]. Some studies even performed solar cell efficiency modeling, using



OPEN ACCESS

EDITED BY
Liangliang Lu,
Nanjing Normal University, China

REVIEWED BY
Xinzhong Li,
Henan University of Science and
Technology, China
Xinxing Zhou,
Hunan Normal University, China
Guanghui Liu,
Guangdong Polytechnic Normal
University, China

*CORRESPONDENCE
L. M. Pérez,
lperez@academicos.uta.cl

SPECIALTY SECTION
This article was submitted to Optics
and Photonics,
a section of the journal
Frontiers in Physics

RECEIVED 12 May 2022
ACCEPTED 27 June 2022
PUBLISHED 26 August 2022

CITATION
Kria M, Nautiyal VV, Lakaal K,
El Hamdaoui J, Pérez LM, Varsha,
Laroze D, Prasad V, Long G and Feddi E
(2022), Rashba effect on linear and
nonlinear optical properties of a
cylindrical core/shell heterojunction
quantum dot.
Front. Phys. 10:942758.
doi: 10.3389/fphy.2022.942758

COPYRIGHT
© 2022 Kria, Nautiyal, Lakaal, El
Hamdaoui, Pérez, Varsha, Laroze,
Prasad, Long and Feddi. This is an open-
access article distributed under the
terms of the Creative Commons
Attribution License (CC BY). The use,
distribution or reproduction in other
forums is permitted, provided the
original author(s) and the copyright
owner(s) are credited and that the
original publication in this journal is
cited, in accordance with accepted
academic practice. No use, distribution
or reproduction is permitted which does
not comply with these terms.

Rashba effect on linear and nonlinear optical properties of a cylindrical core/shell heterojunction quantum dot

M. Kria^{1,2}, Vijit V. Nautiyal³, K. Lakaal^{1,2}, J. El Hamdaoui^{1,2},
L. M. Pérez^{4*}, Varsha^{3,5}, D. Laroze⁶, V. Prasad⁷, G. Long⁸ and
E. Feddi^{1,9}

¹Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco, ²Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCScI), Faculty of Sciences Rabat, Mohammed V University in Rabat, Morocco V University in Rabat, Rabat, Morocco, ³Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi, India, ⁴Departamento de Física, FACH, Universidad de Tarapacá, Arica, Chile, ⁵Department of Physics, Kalindi College, University of Delhi, Delhi, India, ⁶Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Arica, Chile, ⁷Department of Physics, Swami Shradhdhanand College, University of Delhi, Delhi, India, ⁸Department of Physics, St. John's University, Jamaica, NY, United States, ⁹Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Ben Guerir, Morocco

Rashba effect may play an important role in the nonlinear optical properties of heterojunction quantum dots. In this work, we have theoretically examined the effects of Rashba spin-orbit interaction on an electron in a cylindrical core/shell quantum dot (CCSQD). The modifications of various properties of cylindrical core/shell quantum dot such as transition energies, dipole transition matrix elements and linear and nonlinear optical properties due to change in Rashba coupling parameter, magnetic field and effective Rydberg energy were studied. We solved the Schrödinger equation using numerical methods and obtained energy eigenvalues as functions of the aforementioned parameters. It was observed that, the magnetic field has a considerable effect on absorption coefficients and refractive index. It was also observed that increasing the magnetic field shifts the resonances towards higher energies. Additionally, increasing in the Rashba coupling coefficient (α_R) was found out to result an increase in absorption coefficients and refractive index. Our results demonstrated that, we can manipulate optical properties of cylindrical core/shell quantum dot using an external magnetic field.

KEYWORDS

core/shell, quantum dots, Rashba effect, external magnetic field, nonlinear optical properties



PAPER

Optical properties of donor impurity in Yukawa like potential: application to SiGe/Si and Si/SiGe RECEIVED
17 November 2022REVISED
17 March 2023ACCEPTED FOR PUBLICATION
27 March 2023PUBLISHED
6 April 2023Varsha^{1,2,*}, M Kria³, Vijit V Nautiyal¹, K Lakaal³, D Laroze⁴, L M Pérez⁵, V Prasad^{6,*} and E Feddi^{3,7,*}¹ Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi—110007, India² Department of Physics, Kalindi College, University of Delhi, Delhi—110008, India³ Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials, ENSAM, Mohammed V University in Rabat, Morocco⁴ Instituto de Alta Investigación, CEDENNA, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica, Chile⁵ Departamento de Física, FACH, Universidad de Tarapacá, Casilla 7 D, Arica, Chile⁶ Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, Delhi—110036, India⁷ Institute of Applied Physics, Mohammed VI Polytechnic University, Lot 660, Hay Moulay Rachid Ben Guerir, 43150, Morocco

* Authors to whom any correspondence should be addressed.

E-mail: varsha.yadav610@gmail.com, vprasad@ss.du.ac.in and e.feddi@um5r.ac.ma

Keywords: quantum dot, refractive index changes, absorption coefficient

Abstract

We have investigated the effect of temperature and geometrical confinement on the behavior of spherical cavities with Yukawa potential presence inside the cavity within effective mass approximation. Using the Finite-element method, we have calculated the energy eigenvalue with the geometric and temperature effects into consideration with consideration of temperature and position-dependent mass, and position-dependent dielectric constant. The optical transition from the ground to the excited state shows a blueshift in optical absorption coefficient, refractive index changes, and second and third harmonic generation with an increase in temperature. The increase in the geometric size of the spherical cavity causes a redshift in the optical resonance peaks.

1. Introduction

The study of quantum heterostructures has had a special place in research since its discovery due to its relevance in different technologies and fields [1–10]. Quantum heterostructures' response to external fields is an area of increasing interest as these external fields include pressure, temperature, electric fields, magnetic fields, laser fields, etc [11–15] are the tools to manipulate the optoelectronic properties and amend them to our advantage. We can exploit these electronic and optical properties as per the requirements of the optoelectronic device by tuning these parameters. Another way is to make changes in the shape and size of the heterostructure [16–23] but these fabrication techniques are expensive and time-consuming so these external fields come in handy. In the literature, several studies are devoted to this field, a few of which are given in references [24–27]. In 1998, Perlín *et al* [28] used probes like pressure, temperature, and excitation power to study InGa_N/Ga_N quantum wells. Their study reported a characteristic 'blueshift' with increasing pumping power in the energies of photo- and electro-luminescence transitions in InGa_N quantum wells which have been attributed either to band-tail filling or to a screening of piezoelectric fields. P. Dawson *et al* [29] studied temperature-dependent optical properties of InAs/GaAs quantum dots both theoretically and experimentally. The authors reported that carrier dynamics are governed by independent carrier relaxation at elevated temperatures. The optical properties of a hydrogenic impurity in a disc-shaped quantum dot with effects of hydrostatic pressure and temperature with parabolic confinement in the presence of an external electric field were studied by Liang and Xie [30]. The authors showed that with increasing pressure both the total absorption coefficient and the refractive index change cause a blueshift and redshift for donor and acceptor impurities respectively. However, the reverse is observed with increasing temperature. Kirak *et al* [31] studied the non-linear optical properties in the presence of the electric field, hydrostatic pressure, and temperature for a spherical QD with parabolic confinement using

Résumé

Cette thèse est une recherche sur la compréhension des effets du couplage Rashba spin-orbite et de l'interaction électron-phonon/trou-phonon sur les propriétés magnétiques, thermodynamiques, magnétocaloriques et de magnéto-transport dans les systèmes confinés. Afin de déterminer toutes ces propriétés, nous avons d'abord résolu l'équation de Schrödinger pour obtenir les niveaux d'énergie. Puis nous avons obtenu toutes les fonctions thermodynamiques en utilisant l'ensemble canonique. Le calcul numérique de notre formalisme est appliqué essentiellement aux composés du groupe (III-V) GaN et InAs dans la première partie et aux semi-conducteurs magnétiques dilués (Ga,Mn)As dans la deuxième partie. Nos résultats montrent également que toutes ces propriétés dépendent fortement du champ magnétique, du confinement, de l'effet polaronique et de l'interaction spin-orbite de Rashba. L'analyse de l'aimantation et de la susceptibilité confirme que la phase antiferromagnétique est associée à un ordre ferromagnétique dans le GaMnAs, ce qui est en bon accord avec la majorité des travaux antérieurs.

Mots-clefs : Rashba, Couplage électron/trou-phonon, Semi-conducteurs magnétiques dilués, Magnétisation, spintronique.

Abstract

This thesis is a research project on understanding the effects of Rashba spin-orbit coupling and electron-phonon/hole-phonon interaction on magnetic, thermodynamic, magnetocaloric and magneto-transport properties in confined systems. To determine all these properties, we first solved the Schrödinger equation to obtain the energy levels. Then we obtained all the thermodynamic functions using the canonical ensemble. The numerical calculation of our formalism is applied essentially in the first part to the GaN and InAs which are (III-V) compounds and to diluted magnetic semiconductors (Ga,Mn)As in the second part. Our results also show that all these properties depend strongly on the magnetic field, the confinement, the polaron effect and the Rashba spin-orbit interaction. The analysis of the magnetization and susceptibility confirms that the antiferromagnetic phase is associated with a ferromagnetic order in GaMnAs, which is in good agreement with the majority of previous work.

Keywords : Rashba, Electron/hole-phonon coupling, Diluted magnetic semiconductors, Magnetization, spintronics.