



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Larbi Tébessi –Tébessa-
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département : science de la matière



MEMOIRE DE MASTER
Domaine: science de la matière
Filière: Physique
Option: Physique de la matière condensée



Thème:

Effet couplage spin-orbite de Rashba sur le modèle de Stoner pour électrons itinérants

Présenté par:
Kebaili Selwa

Devant le jury:

Boumali Abdelmalek	Pr	Université de Tébessa	Président
Boudiar Abid	M.C.B	Université de Tébessa	Rapporteur
Tag Mohamed Amine	M.A.A	Université de Tébessa	Examineur

Date de soutenance: 23/05/2017

Note :18..... Mention :Excellent.....



Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)



Je soussigné(e),

Nom, Prénom : Kebaili Selma

Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département : Sciences de la Matière

N° de carte d'étudiant : 4002309 / 2010

Année universitaire : 2016-2017

Domaine : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Spécialité : Physique de la Matière condensée

Intitulé du mémoire : Effet couplage spin-orbite de

Asakura sur le modèle de Stoner

pour électrons itinérants

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

Fait à Tébessa, le : 11-06-2017

Signature de l'étudiant(e) :

DEDICACE

Nous tenions à dédier ce travail à :

En premier lieu notre Parents qui ne nous cesse pas de m'encourager.

Nos sœurs, nos frères

Toutes nos grandes familles.

Tous nos amis.

Nos enseignants.

Et tous ceux qui nous aidé et soutenu de près ou de loin durant l'élaboration de ce travail.

*A tous ceux qui ont sacrifié leur temps pour la science et à
tous ceux qui ont utilisé la science pour le bien et la
prospérité de l'humanité.*

Remerciement

Nous tiens tout d'abord à remercier grandement Dieu de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce travail.

*Mes sincères remerciement vont au notre promoteur le **Dr Boudiar Abid** Maitre Conférence B au département des Science de la Matière de la Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie de l'Université Larbi Tébessi , d'avoir proposé et dirigé ce travail, pour son aide, ses conseil, son orientation et son intérêt qu'il n'a cessé de m'apporter.*

*Même, mes sincères remercier le professeur **Abdelmalek Boumali** professeur au département des Sciences de la Matière de la Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie de l'Université Larbi Tébessi , de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.*

*Je souhaite remerciements vont au Maitre **Tag Mohamed Amine** Maitre Assistance A au département des Science de la Matière de la Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie de l'Université Larbi Tébessi , qui a bien voulu accepter de faire partie de jury et d'examiner mon travail.*

Nous ne peux oublier tous ceux qui ont contribué à ma formation depuis le premier jusqu'à ce jour.

Sommaire

TABLE DES MATIÈRES

- ✚ Dédicaces
- ✚ Remerciements
- ✚ Sommaire
- ✚ Abréviations
- ✚ Liste des figures

Introduction Général.....	1
----------------------------------	----------

Chapitre I : L'effet Rashba et le modèle de Stoner

I.1.Introduction.....	3
I.1. L'effet Rashba.....	4
I.1.1.Définition.....	4
I.1.2.Historique.....	4
I.1.3.Fractionnement du spin dû à l'effet Rashba.....	5
I.1.4.Rotation de spin	6
I.1.5.Procédure expérimentale pour déterminer α_{so}	8
I.1.6 Origine du couplage Spin-Orbite Rashba.....	8
I.1.7.Mesure du couplage Spin-Orbite Rashba.....	10
I.1.8. Physique de l'effet Rashba.....	11
I.1.9.Champ de Rashba et précession de spin.....	11
I.1.10.Courbure de baies et effets de spin Hall.....	12
I.1.11.Applications.....	14
I.2.Modèle de stoner.....	15
I.2.1. La séparation spontanée de spin.....	15

<i>I.2.2. Les métaux, les électrons itinérants, Et la possibilité de Ferromagnétisme.....</i>	<i>22</i>
<i>I.2.2.1 Théorie des champs moyens: l'instabilité des Stoner</i>	<i>23</i>
<i>I.2.3 Théorie des champs moyens de Stoner du modèle Hubbard.....</i>	<i>24</i>

Chapitre II : Calcul théorique

<i>II.1. Calcul de l'hamiltonien total</i>	<i>31</i>
<i>II.1.1. L'hamiltonien de Rashba</i>	<i>32</i>
<i>II.1.2. L'énergie de Rashba.....</i>	<i>35</i>
<i>II.2.1. Hamiltonien de Stoner</i>	<i>36</i>
<i>II.2.2. L'énergie de Stoner</i>	<i>37</i>
<i>II.3.1. Hamiltonien totale.....</i>	<i>38</i>
<i>II.3.2. L'énergie totale</i>	<i>38</i>

Chapitre III : la simulation

<i>III.1. Définition de Simulation... ..</i>	<i>40</i>
<i>III.2. Les paramètre</i>	<i>40</i>
<i>III.3 Représentation schématique</i>	<i>42</i>
<i>III.3.1. L'effet spin orbite de Rashba.....</i>	<i>42</i>
<i>III.3.2. Le modèle de stoner.....</i>	<i>43</i>
<i>III.3.3. Système de couplage de l'effet de Rashba sur modèle de stoner</i>	<i>43</i>
<i>III.4 Les résultats de simulation</i>	<i>44</i>
<i>Conclusion générale.....</i>	<i>51</i>

Liste des symboles

Abréviations

SO : spin-orbite

H_R : Hamiltonien de Rashba

H_{STONER} : Hamiltonien de Stoner

$C_{J+1,\sigma}^+$: Opérateur de création

$a_{k\sigma}^+$: Opérateur de création

$C_{J,\sigma}$: Opérateur d'annihilation

$a_{k\sigma}$: Opérateur d'annihilation

α : Coefficients de Rashba

E_y : Champ électrique selon y

E_z : Champ électrique selon z

ARPES : Spectroscopie photo-électronique à résolution angulaire

Liste des figures

Liste de figures

Figure N ^o	Titre	Page
I.1.1	Dispersion énergétique du système d'électrons bidimensionnel avec le fractionnement de Rashba.	5
I.1.2	Exemples de précession de spin.	7
I.1.3	Echantillon expérimental et structure FET.	8
I.1.4	fractionnement de spin Rashba aux interfaces	10
I.1.5	Rashba spin-orbite interaction. Les électrons mobiles (k_x) avec un champ électrique perpendiculaire (E_z) induisent le champ Rashba, B_{ry} (en haut). Dans un système Rashba, les électrons polarisés par spin précipitent autour de l'axe du champ de Rashba	12
I.1.6	Diagramme montrant diverses réalisations de spin Orbitronique	13
I. 2.1	Densité d'états pour spin up et spin down des électrons présentant un spin faire tourner spontané sans appliquer un champ magnétique externe.	15
I. 2.2	Valeurs du paramètre de Stoner U , densité d'états par atome $g(E_F)$ à l'énergie de Fermi, et $U \cdot g(E_F)$ en fonction du nombre atomique Z .	17
I. 2.3	Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect a l'énergie de Fermi E_F .	19
I. 2.4	Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect a l'énergie de Fermi E_F pour Pd qui présente également une grande valeur à E_F par rapport à Fe	20
I. 2.5	Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect a l'énergie de Fermi E_F pour le métal noble Cu. Aucun état d n'est présent chez E_F qui Entraîne une petite amplitude du DOS total.	21
I. 2.6	a : Calcul de la densité d'états décomposée en spin en fonction d'énergétique par rapport à l'énergie de Fermi E_F pour Fe en tenant compte de l'échange scission.	22

TABLE DES MATIÈRES

	b: Structure de bande résolue calculée du spin de Fe. Les bandes majoritaires sont Caractérisées par des points sombres, des bandes minoritaires par des points lumineux.	
I. 2.7	Magnétisme en fonction de $\frac{k_B\theta}{E_F^{para}}$	28
III.1	Propriétés du spectre énergétique de Rashba.	42
III.2	Représentation schématique du modèle de Stoner.	43
III.3	Schéma représenté le système de couplage effet Rashba sur le modèle de Stoner.	43
III.4	la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeurs de $\alpha_y = 0$, $f = 0$.	44
III.5	la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeurs de $\alpha_y = 0$, $f \neq 0$.	45
III.6	la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour $\alpha_y = 0$ (pour une forme cylindrique)	45
III.7	la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et modèle de stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500$	46
III.8	la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et modèle de stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500$	47
III.9	la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de rashba et model de stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 5000$	47
III.10	la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500000$	48
III.11	la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et model de stoner pour $\alpha_y \neq 0$ (pour une forme cylindrique)	49

Introduction Générale

Introduction générale

D'après le principe d'exclusion de Pauli, deux électrons ne peuvent pas être dans le même état quantique. Alors, s'ils ont des spins parallèles et de même sens, donc la même aimantation, ils sont obligés de rester loin les uns des autres. S'ils ont des spins opposés, donc deux aimantations qui s'annulent, ils peuvent se rapprocher autant qu'ils veulent. Si les électrons ont des spins opposés, se rapprochant très près les uns des autres, alors qu'ils sont tous chargés négativement, cela entraîne une forte énergie potentielle électrostatique. S'ils ont des aimantations qui s'ajoutent, ils restent loin et l'énergie potentielle électrostatique est faible. Il devient donc favorable énergétiquement que les électrons de conduction se regroupent en domaines où ils ont tous une aimantation qui a la même direction et le même sens, ce qui est la caractéristique d'un corps ferromagnétique donc très fortement aimantable. Le couplage spin-orbite rend le degré de liberté de rotation réagir à son environnement orbital. Dans les solides, cela génère des phénomènes aussi intrigants qu'un fractionnement de spin d'inversion d'états d'électrons, des systèmes asymétriques même à un champ magnétique nul et un fractionnement de Zeeman qui est nettement amélioré en grandeur par rapport à celui des électrons libres [1].

L'effet de Stoner qui explique le magnétisme des électrons de conduction marche uniquement si les électrons sont forcés à être près les uns des autres, pour que seul le principe d'exclusion de Pauli les force à avoir la même aimantation pour qu'ils puissent s'éloigner et ainsi diminuer l'énergie potentielle électrostatique de répulsion. Il marche donc uniquement quand il y a une forte densité d'électrons de conduction. C'est le cas du fer, du cobalt et du nickel.

L'effet de Rashba, découvert en 1959, continue de fournir un terrain fertile pour la recherche fondamentale et les applications. Il a servi de base à la proposition du transistor de spin par Datta et Das en 1990, qui a largement inspiré le champ large et dynamique de la spintronique. Des développements plus récents comprennent de nouveaux matériaux pour l'effet Rashba tels que les surfaces métalliques, les interfaces et les matériaux en vrac. Il a également donné lieu à de nouveaux phénomènes tels que les courants de spin et l'effet Hall spin, y compris sa version quantifiée, qui a conduit au domaine très actif des isolateurs topologiques. [2]

L'objectif principal de cette recherche est d'étudier l'effet de Rashba sur le modèle Stoner et trouver des nouvelles applications.

La mémoire est organisée autour de trois chapitres:

- Le premier chapitre est consacré à présenter un aperçu de chacun de l'effet Rashba et modèle Stoner.
- Dans le chapitre II décrit les calculs théoriques d'hamiltonien des interactions de Rashba et Stoner.
- Dans le troisième chapitre, nous discutons et interpréter les résultats obtenu à partir de la simulation grâce à Mathematica10 au modèle de l'effet Rashba et le modèle de stoner.
- Enfin, nous sommes à la fin de notre mémoire par une conclusion générale à qui seront résumés les résultats principaux obtenus au cours de ce travail.

Chapitre I
L'effet Rashba et le modèle de
Stoner

L'interaction spin-orbite qualifie toute interaction entre le spin d'une particule et son mouvement. Le premier et le plus connu des exemples de cette interaction est la production de décalage dans les niveaux d'énergie électronique en raison de l'interaction entre le spin de l'électron et le champ électrique nucléaire dans lequel il se meut. [3]

Quel est l'effet de Rashba ?

Quel est le modèle Stoner ?

L'objectif de ce chapitre est l'étude bibliographique pour l'effet Rashba et le modèle de Stoner, alors nous commençons par une introduction sur les Spine-orbites. Ensuite, nous étudions l'effet Rashba et le modèle Stoner.

I. INTRODUCTION

L'importance du couplage spin-orbite (SO) pour la structure de la bande des électrons Bloch a été notée pour la première fois par Elliott [4] et Dresselhaus et al [5]. Elliott a souligné que nous obtenons (au moins) une double dégénérescence de spin des bandes d'énergie $E_n(\vec{k})$ pour chaque vecteur d'onde \vec{k} dans la zone de Brillouin si l'inversion de l'espace est une bonne symétrie de la structure cristalline. Dresselhaus et al [5] (voir aussi [6]) a démontré que le fractionnement SO des orbitales atomiques p peut qualitativement modifier les spectres de résonance cyclotron dans le silicium et le germanium.

À l'aide de la théorie des groupes, Dresselhaus [7] a étudié l'effet du couplage de SO sur les semi-conducteurs avec la structure asymétrique de zinc blende inversée, qui est la structure cristalline de nombreux semi-conducteurs III-V et II-VI tels que GaAs, InSb et CdTe (voir aussi [8]). Il a prédit un fractionnement de spin anisotrope de la dispersion $E(\vec{k})$, cubique dans le vecteur \vec{k} de vague pour les bandes avec symétrie Γ_6 , qui est devenu connu sous le nom de 'fractionnement de Dresselhaus SO'. [9]

I.1. L'EFFET RASHBA

I.1.1. Définition

L'effet Rashba, ou l'effet Rashba-Dresselhaus, est un fractionnement dépendant de l'élan des bandes de spin dans les systèmes bidimensionnels de matière condensée (hétéro-structures et états de surface) semblables au fractionnement des particules et des antiparticules dans l'hamiltonien de Dirac. Le fractionnement est un effet combiné du couplage atomique spin-orbite et de l'asymétrie du potentiel dans la direction perpendiculaire au plan bidimensionnel. Cet effet est nommé en l'honneur d'Emmanuel Rashba qui l'a découvert. [10]

Remarquablement, cet effet peut entraîner une grande variété de phénomènes physiques nouveaux, même s'il s'agit d'une petite correction de la structure de bande de l'état métallique bidimensionnel.

En outre, les supraconducteurs à grande fracture de Rashba sont suggérés comme réalisations possibles de l'état élogieux Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) et le supraconducteur topologique de p-onde désiré.

Dernièrement, un couplage pseudo-spin-orbite dépendant de l'inertie a été réalisé dans des systèmes atomiques froids. [11]

I.1.2. Historique

"Les premières observations de l'effet Rashba dans les gaz d'électrons 2D d'hétéro structures semi-conductrices ont été réalisées dans les années 1980, d'après les battements Shubnikov-de Haas, puis les effets d'anti localisation faible sur la magnéto conductance. Ensuite, par spectroscopie Raman électronique, des données très complètes de l'anisotropie résultant de l'interférence des effets Rashba et Dresselhaus dans des puits quantiques de GaAs/AlGaAs ont été obtenues par B. Jusserand et al. A la fin des années 1990, des expériences de contrôle de l'effet Rashba par un champ électrique externe (grilles) ont été initiées, stimulées par la proposition par Datta et Das d'un "transistor de spin" à effet de champ. Dans les années 2000, les effets Rashba et Dresselhaus ont été mesurés dans le domaine temporel (accès à la dynamique de précession), par rotation Kerr/Faraday et photoluminescence résolues en temps.

Notons que récemment, un vif intérêt a été porté à l'effet Rashba dans d'autres systèmes d'électrons 2D. Cet effet peut être plusieurs ordres de grandeur supérieur ($\alpha \sim 100 - 1000 \text{ meV \AA}$) à l'effet Rashba des hétéro structures semi-conductrices traditionnelles ($\alpha \sim 1 - 50 \text{ meV \AA}$). C'est le cas notamment pour les états de surface de métaux comme le bismuth ou les états de type puits quantique dans des films métalliques ultra-minces (quelques nm). C'est également le cas des états de type puits quantique à proximité de la surface des isolants topologiques comme Bi_2Se_3 , ou à l'interface d'oxydes comme $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ ". [12]

I.1.3. Fractionnement du spin dû à l'effet Rashba

Dans notre recherche, nous utilisons une interaction spin-orbite appelée l'effet Rashba [13] dans le contrôle des spins d'électrons. Un Hamiltonien de l'interaction spin-orbite prend généralement la forme $(\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. En utilisant le potentiel de confinement $V(z)$ du puits quantique pour V , soit $\nabla V(z) = (0, 0, -eE_z)$ et $\hbar\mathbf{k}$ pour \mathbf{P} (moment), on obtient l'Hamiltonien pour l'effet de Rashba en tant que

$$H_R = \alpha_{so} \langle E_z \rangle (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \quad (I.1)$$

Ici, α_{so} est une constante intrinsèque dépendant de la matière pour l'effet de Rashba, $\langle E_z \rangle$ est la valeur attendue de E_z , et σ_x et σ_y sont les matrices de spin de Pauli.

Si nous utilisons une onde plane pour la partie orbitale de la fonction d'onde pour simplifier avec un vecteur d'onde bidimensionnel $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y) = (k, 0)$, les fonctions d'onde (fonctions propres) y compris la partie spin sont données par $\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ \mp 1 \end{pmatrix}$ Avec des auto-énergies respectives $\frac{\hbar^2}{2m^*} \pm \alpha_{so} \langle E_z \rangle k$.

Ainsi, le fractionnement d'énergie entre les deux états $\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ \mp 1 \end{pmatrix}$ À une onde constante vecteur, qui est causée par une interaction spin-orbite associée au potentiel de confinement des hétérostructures semi-conductrices, est appelée fractionnement Rashba (Figure. I.1.1)

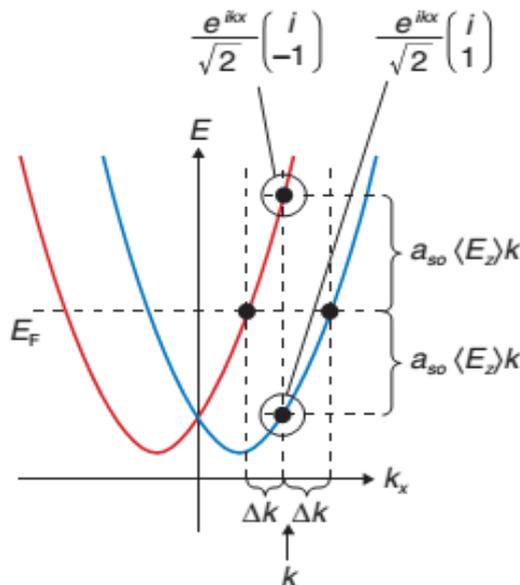


Figure. I.1.1. Dispersion énergétique du système d'électrons bidimensionnel avec le fractionnement de Rashba. [14]

I.1.4. Rotation de spin

Considérons une fonction d'onde superposée

$$\frac{e^{i(k-\Delta k)x}}{2} \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{e^{i(k+\Delta k)x}}{2} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} = ie^{ikx} \begin{pmatrix} \cos(\Delta kx) \\ \sin(\Delta kx) \end{pmatrix} \quad (I.2)$$

Qui se compose de deux fonctions d'onde associées à deux points sur la surface de Fermi ($k \pm \Delta k, 0$), où $\Delta k = \alpha_{so} \langle E_z \rangle / \hbar^2$, Dans un système comportant le fractionnement de Rashba. La partie spin de cette fonction d'onde à $x = 0$ est $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, où le spin est orienté dans la direction z . Les états de spin des électrons pour $x \neq 0$ sont

$$\begin{pmatrix} \cos \Delta kx \\ \sin \Delta kx \end{pmatrix} = \cos(\Delta kx) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin(\Delta kx) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (I.3)$$

Dont l'orientation de spin est $(\sin(2\Delta kx), 0, \cos(2\Delta kx))$ dans un vecteur tridimensionnel. Ainsi, le spin tourne dans le plan x - z en fonction de la position de l'électron x . Un électron dans un semi-conducteur peut être considéré comme un paquet d'ondes ayant un nombre d'onde central. Puisque la vitesse de propagation d'un paquet d'ondes est donnée par sa vitesse de groupe (vitesse de Fermi) $\frac{\hbar k}{m^*}$ un électron en mouvement linéaire uniforme change sa position en fonction de sa vitesse de Fermi. Ainsi, l'orientation de rotation tourne en conséquence. La vitesse angulaire de la rotation du spin électronique est donnée comme $\omega = 2\alpha_{so} \langle E_z \rangle k / \hbar$ dans ce cas. L'accordabilité de $\langle E_z \rangle$. Par une grille externe ou une conception spécifique de l'hétérostructure nous permet de contrôler la vitesse angulaire de rotation des spins, qui est l'un des plus grands attraits de l'effet Rashba. Quelques exemples de rotation de spin pour un électron se déplaçant à la vitesse de Fermi sont représentés sur la **Fig I.1.2**. Où α_{so} agit comme un paramètre indiquant combien il est facile de contrôler la précession de spin électronique par un champ électrique $\langle E_z \rangle$.

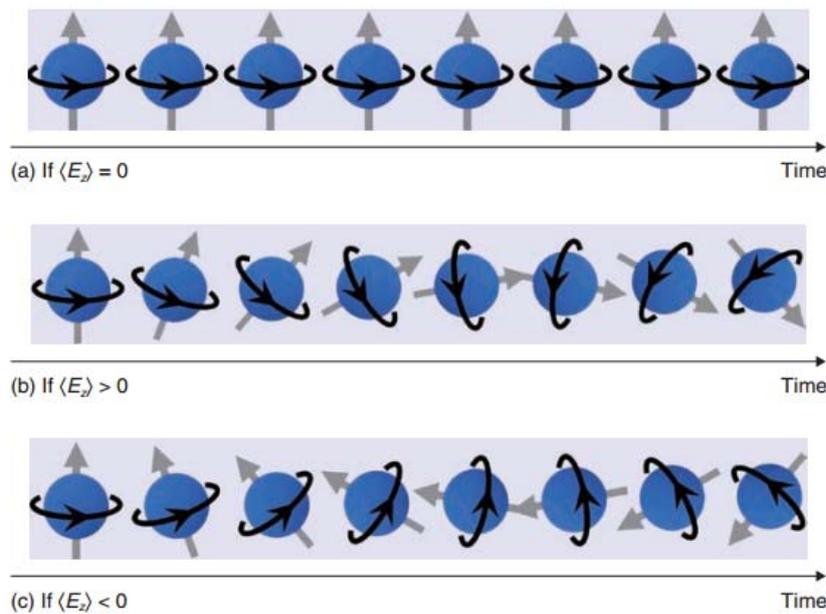


Figure. I.1.2. Exemples de précession de spin. [14]

Dans la recherche sur l'effet de Rashba jusqu'à présent, il a été important d'obtenir une valeur appelée coefficient de Rashba α , qui correspond à $\alpha_{so} \langle E_z \rangle$. Des éléments de preuve circonstancielle montrant que les valeurs α sont contrôlables par une porte avaient été accumulés, bien que personne n'ait pu montrer une relation quantitativement linéaire entre α et $\langle E_z \rangle$.

Les facteurs qui ont retardé l'avancement de cette recherche comprennent: (1) Un Manque de méthodes expérimentales qui permettent de mesurer la valeur de $\langle E_z \rangle$ dans un puits quantique directement et (2) L'incertitude quant à la taille de la division de spin de Dresselhaus (la division de spin découlant de l'asymétrie d'inversion de masse) qui coexiste avec la division des spins de Rashba. Nous avons démontré quantitativement la relation linéaire $\alpha = \alpha_{so} \langle E_z \rangle$. En utilisant des puits quantiques semi-conducteurs $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}$ (figure I.1.3), qui sont en treillis adaptée à (001) InP; ce qui a conduit à la détermination quantitative de la réussite de la valeur de α_{so} [15]. Une clé de notre succès a été la découverte fortuite d'une plaquette épit axiale qui a la propriété que la valeur de $\langle E_z \rangle$ peut apparemment être modifiée de positif à des valeurs négatives au moyen de déclenchement. Expériences prudent avec cette plaquette épit axiale et une série de plaquettes similaires ont abouti à notre détermination quantitative de α_{so} .

I.1.5. Procédure expérimentale pour déterminer α_{so}

L'éprouvette utilisée dans l'expérience de détermination de α_{so} était un puits quantique de 10-nm- d'épaisseur $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ semi-conducteur bien développé sur le plan (001) D'un substrat InP (avec des couches barrières de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$). Les chercheurs contrôlent la densité électronique et le champ électrique perpendiculaire $\langle E_z \rangle$ à l'intérieur du puits quantique au moyen d'une grille de surface dans une structure à transistor à effet de champ (**figure I.1.3.**). Ils ont utilisé un réfrigérateur à dilution pour refroidir l'échantillon à ~ 100 mK (température électronique), afin de minimiser l'effet de perturbation thermique et d'augmenter la sensibilité de mesure, et mesuré la résistance électrique en fonction du champ magnétique perpendiculaire (magnétorésistance) pour différentes tensions de grille. Dans ces mesures, un phénomène distinctif appelé anti-localisation faible apparaissait à proximité de champ magnétique nul, Interférence des fonctions d'ondes électroniques. Nous avons pu déterminer la valeur du coefficient de Rashba α en analysant théoriquement ce phénomène expérimentalement observé. [16]

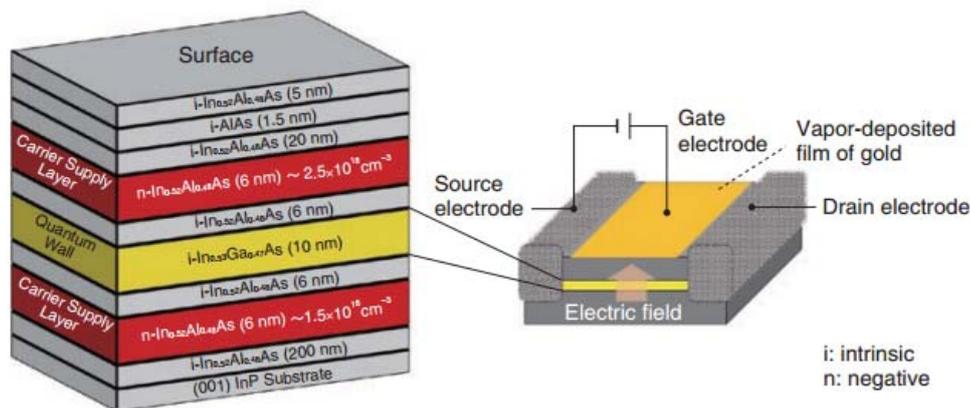


Figure. I.1.3. Echantillon expérimental et structure FET. [14]

I.1.6. Origine du couplage Spin-Orbite Rashba

Lorsqu'un électron avec l'impulsion p se déplace dans un champ magnétique \mathbf{B} , il éprouve une force de Lorentz dans la direction perpendiculaire à son mouvement $\mathbf{F} = -e\mathbf{p} \times \mathbf{B} / m$ et possède l'énergie de Zeeman $\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$, où $\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur des matrices de spin de Pauli, m et e sont respectivement la masse et la charge de l'électron, et $\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$ est le magnon de Bohr. Par analogie, lorsque cet électron se déplace dans un champ \mathbf{E} électrique, il éprouve un champ magnétique $\mathbf{B}_{eff} \sim \mathbf{E} \times \mathbf{p} / mc^2$ dans son cadre de repos (où c 'est la vitesse de la lumière) - un champ qui induit également un Zeeman Énergie appelée couplage $H_{SO} \sim \mu_B (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} / mc^2$. Dans les cristaux, Le champ électrique est donné par le gradient du potentiel cristallin, $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$

Dans les puits quantiques avec symétrie d'inversion structurelle brisée le long de la croissance direction \vec{z} , les sous-bandes de spin sont divisées en énergie (voir la figure I.1.4 (a, b)). Un tel fractionnement de la bande est également observé sur certaines surfaces métalliques (voir la figure I.1.4 (d)) et a été expliqué par Bychkov et Rashba en considérant un champ électrique $\vec{E} = E_z \vec{z}$ résultant en un couplage SO efficace de la forme [17].

$$\hat{H}_R = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{z} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{I.4})$$

Où α_R s'appelle le paramètre Rashba. Néanmoins, cette forme pratique, dérivée d'ondes planes fort-dimensionnelles, n'est que phénoménologique et ne s'applique pas en soi sur des systèmes réalistes.

En effet, les études théoriques ont montré que le manque de symétrie d'inversion crée non seulement un champ électrique supplémentaire E_z mais déforme également la fonction d'onde électronique proche des noyaux où l'approximation de l'onde plane n'est pas valide [18]. En d'autres termes, à l'état solide, l'écart de Dirac $mc^2 \approx 0.5 \text{ MeV}$ est remplacé par l'espace d'énergie $\approx 1 \text{ eV}$ entre les électrons et les trous et $\alpha_R/\hbar \gg \mu_B E_z/mc^2$. En outre, la rupture de symétrie d'inversion n'impose que le couplage SO Impair dans l'élan électronique \vec{p} , c'est-à-dire, $\vec{w}(\vec{p}) = -\vec{w}(\vec{p})$, Comme dans le cas du couplage p-cubique de type Dresselhaus SO dans les semi-conducteurs composés de zinc-blende III-V [19]. Il devient linéaire en \vec{p} seulement dans certaines conditions (par exemple, lorsque l'approximation électronique libre est valide ou sous contrainte). Par conséquent, dans la discussion fournie dans le présent examen, il faut garder à l'esprit que le couplage p-linéaire Rashba SO est une approximation phénoménologique utile qui ne reflète pas entièrement la forme réelle du couplage SO dans les systèmes asymétriques d'inversion

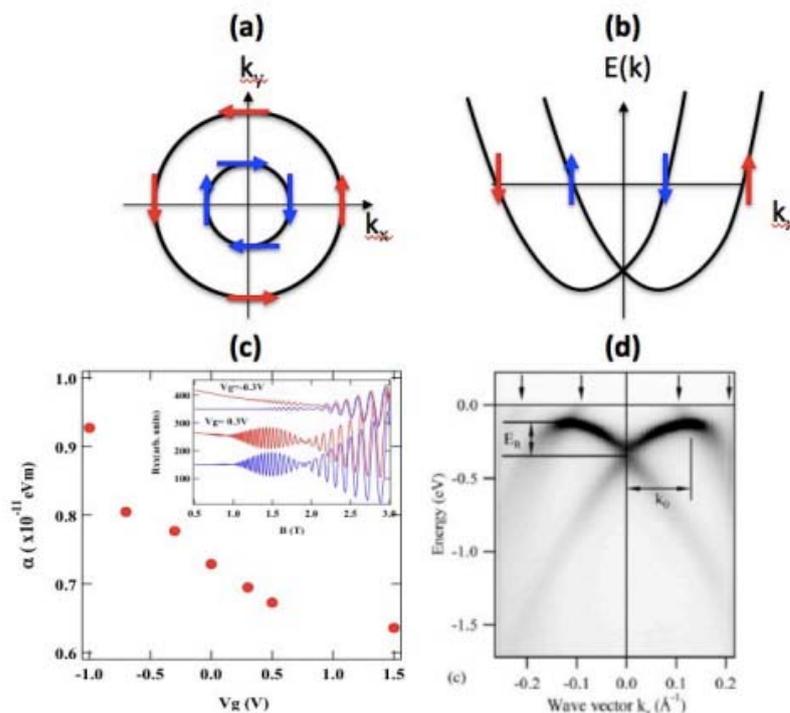


Figure I.1.4:fractionnement de spin Rashba aux interfaces: (a) Schéma de la surface de Fermi d'un gaz à électrons libre bidimensionnel avec couplage spin-orbite Rashba: le moment angulaire de rotation est bloqué sur l'élan linéaire; (B) Schéma de la dispersion d'énergie avec verrouillage par rotation; (C) Contrôle de la porte de la grandeur du paramètre de couplage spin-orbite Rashba dans le puits quantique InAlAs / InGaAs - Insertion: oscillations Shubnikov-de Haas à partir desquelles le paramètre Rashba est extrait; (D) Dispersion d'énergie à la surface de l'alliage Bi / Ag mesurée par ARPES affichant un fractionnement clair de Rashba . [35]

I.1.7. Mesure du couplage Spin-Orbite Rashba

L'ampleur du paramètre phénoménologique de Rashba α_R a été estimée en une large gamme de matériaux présentant une rupture de symétrie par inversion inter-faciale ou en vrac. L'analyse des oscillations de Shubnikov-de Haas et de la précession de spin dans InAlAs / InGaAs [20, 21] (voir figure I.1.4 (c)) donne un paramètre Rashba ($\sim 0.67 \times 10^{-11}$ eV.m) comparable aux estimations récentes Dans les hétéro-facettes LaAlO_3 / SrTiO_3 en utilisant des mesures de localisation faibles ($\sim 0,5 \times 10^{-11}$ eV.m) [22,23]. Les signatures du couplage Rashba SO ont également été confirmées à la surface de métaux lourds tels que Au [24] ou Bi / Ag alliages [25], en utilisant la spectroscopie photoémission à angle (ARPES) et révélant un effet Rashba gigantesque, environ deux commandes De grandeur plus grande que dans les semi-conducteurs ($\sim 3,7 \times 10^{-10}$ eV.m pour l'alliage Bi / Ag). Plus récemment, les isolateurs topologiques ont montré des paramètres comparables de Rashba ($\sim 4 \times 10^{-10}$ eV.m pour Bi_2Se_3 [26]). Les structures présentant une rupture de symétrie d'inversion en vrac montrent également une évidence d'un fractionnement SO de type Rashba de la structure de la bande. Par exemple, le

semi-conducteur polaire BiTeI affiche un paramètre Rashba en vrac ($\sim 3,85 \times 10^{-10}$ eV.m [27]) aussi grand que sur la surface des isolateurs topologiques.

I.1.8. Physique de l'effet Rashba

Pour discuter de la physique induite par le couplage de SO dans des systèmes dépourvus de symétrie d'inversion, considérons le couplage p-linéaire Rashba SO, Eq. (I.5), introduit précédemment [28]. Cette équation décrit un terme de Zeeman impliquant un champ magnétique proportionnel au moment de l'électron p. Par conséquent, lorsque les électrons circulent le long de l'axe x des abscisses, ils expérimentent un champ magnétique efficace le long de l'axe y, B_{ry} appelé le champ de Rashba, comme représenté sur la Fig.I.1.5 (en haut). La grandeur du champ de Rashba peut être calculée à partir de :

$$B_{ry} = 2\alpha_R k_F / g\mu_B \quad (I.5)$$

Où k_F et g sont le vecteur d'ondes Fermi et le facteur g des porteurs dans le canal de conduction, respectivement.

I.1.9. Champ de Rashba et précession de spin

Lorsque le spin de l'électron n'est pas aligné avec le champ de Rashba, la précession de rotation a lieu avec une fréquence qui dépend de la grandeur du champ. Dans la Fig. I.1.5, Les électrons polarisés par spin injectés le long du processus de l'axe x des abscisses sous l'influence du champ Rashba, même sans champ magnétique appliqué. La grandeur du champ électrique, et donc la force du champ de Rashba et le taux de précession de rotation peuvent être contrôlés par une tension de grille [21, 29,30] (voir la figure I.1.4 (c)). Dans le régime diffusif, cette précession est à l'origine du soi-disant mécanisme de relaxation spin D'Oakonov-Perel [31].

Une conséquence intéressante de l'émergence du champ de Rashba est la possibilité de polariser l'électron circulant dans la direction de ce champ. Cet effet, appelé effet galvanique de spin inverse [32], a une contrepartie appelée effet galvanique de spin [33], c'est-à-dire la conversion de la densité d'essorage non équilibrée (créée par des moyens optiques ou électriques) en un courant de charge.

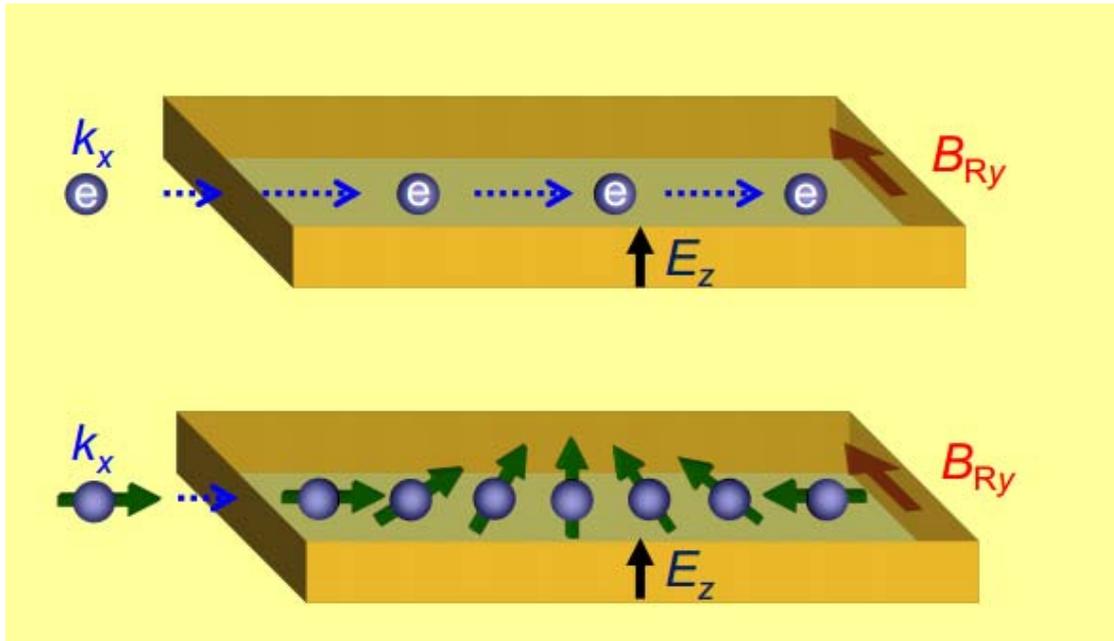


Figure.1.5 | Rashba spin-orbite interaction. Les électrons mobiles (k_x) avec un champ électrique perpendiculaire (E_z) induisent le champ Rashba, B_{Ry} (en haut). Dans un système Rashba, les électrons polarisés par spin précipitent autour de l'axe du champ de Rashba [35]

I.1.10. Courbure de baies et effets de spin Hall

L'effet Rashba modifie la vitesse selon

$$\vec{v}_a = \partial_{\vec{v}} \hat{H}_R = -(\alpha_R / \hbar) \vec{z} \times \vec{\sigma} \quad (I.6)$$

La trajectoire des électrons est "pliée" en raison du couplage SO, d'une manière très similaire à quel point la force de Magnus déforme la trajectoire des boules de filage dans la mécanique classique.

La direction de la distorsion dépend de la direction du moment angulaire (c'est-à-dire de la filature), ce qui entraîne un effet Hall de rotation (voir la figure I.1.6). Cette vitesse supplémentaire peut être formulée en termes de force efficace de Lorentz agissant sur le paquet d'ondes électronique semi-classique. Le champ magnétique efficace qui produit cette force de Lorentz s'appelle la courbure de Berry [34] $\vec{\Omega}(\vec{p}) \propto \alpha_R \vec{V}_v \times (\hat{\sigma} \times \vec{p})$ et ne dépend que de la géométrie de la structure de la bande. La vitesse anormale résultante induit une conductivité hors diagonale qui peut être nulle si la symétrie d'inversion de temps est interrompue. La langue de la courbure de Berry et sa phase associée de Berry a été extrêmement couronnée de succès en décrivant les différentes propriétés des matériaux Rashba et Dirac L'effet Rashba modifie la vitesse selon

$$\vec{v}_a = \partial_{\vec{v}} \hat{H}_R = -(\alpha_R/\hbar) \vec{z} \times \vec{\sigma} \quad (I.6)$$

La trajectoire des électrons est "pliée" en raison du couplage SO, d'une manière très similaire À quel point la force de Magnus déforme la trajectoire des boules de filage dans la mécanique classique.

La direction de la distorsion dépend de la direction du moment angulaire (c'est-à-dire de la filature), ce qui entraîne un effet Hall de rotation (voir la figure I.1.6). Cette vitesse supplémentaire peut être formulée en termes de force efficace de Lorentz agissant sur le paquet d'ondes électronique semi-classique. Le champ magnétique efficace qui produit cette force de Lorentz s'appelle la courbure de Berry [34] $\vec{\Omega}(\vec{p}) \propto \alpha_R \vec{V}_v \times (\hat{\sigma} \times \vec{p})$ et ne dépend que de la géométrie de la structure de la bande. La vitesse anormale résultante induit une conductivité hors diagonale qui peut être nulle si la symétrie d'inversion de temps est interrompue. La langue de la courbure de Berry et sa phase associée de Berry a été extrêmement couronnée de succès en décrivant les différentes propriétés des matériaux Rashba et Dirac [34].

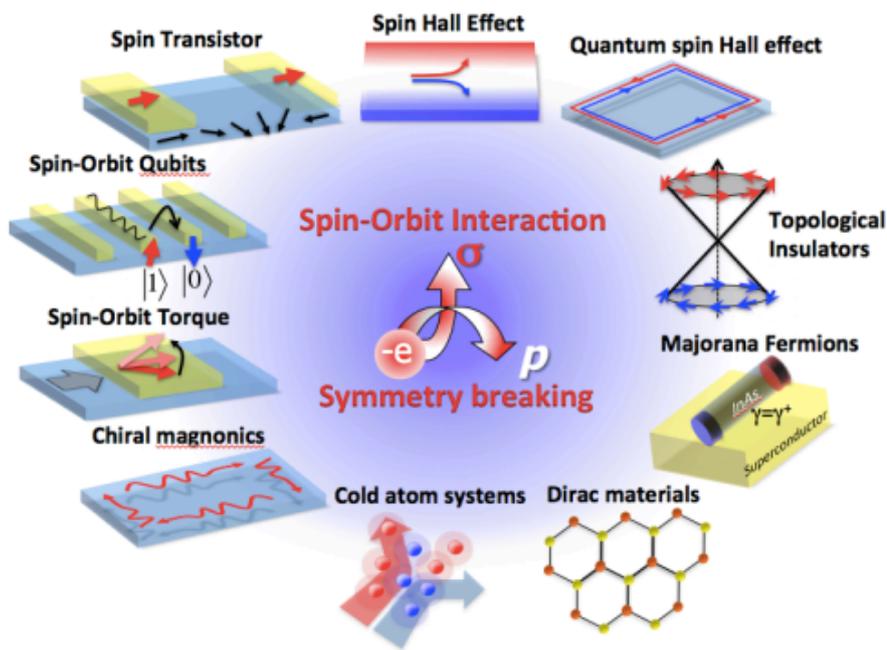


Figure I.1.6 Diagramme montrant diverses réalisations de spin Orbitronique: à partir du moment où le couplage SO est présent dans les systèmes à la symétrie d'inversion brisée, des propriétés de transport uniques apparaissent en donnant naissance au champ de dynamique de spin Orbitronique, l'art de manipuler le spin à l'Aide du couplage SO. [35]

On obtient l'équation d'hamiltonien Rashba [36] :

$$H_R = -\alpha_z \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + H. C. \right) + \alpha_y \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + H. C. \right) \quad (1.7)$$

Telle que :

α_z, α_y : des coefficients de Rashba

σ_y, σ_z : des matrices de Pauli

$C_{J+1,\sigma}^+$: Opérateur de création

$C_{J,\sigma}$: Opérateur d'annihilation

I.1.11 Applications

Spintronics - Les appareils électroniques sont basés sur la capacité de manipuler la position des électrons au moyen de champs électriques. De même, les dispositifs peuvent être basés sur la manipulation du degré de liberté de rotation. L'effet Rashba permet de manipuler le spin par le même moyen, c'est-à-dire sans l'aide d'un champ magnétique. De tels dispositifs présentent de nombreux avantages par rapport à leurs homologues électroniques. [37]

Calcul quantique topologique - Dernièrement, il a été suggéré que l'effet Rashba puisse être utilisé pour réaliser un supraconducteur à ondes p . Un tel supraconducteur a des états de bord très spéciaux qui sont connus sous le nom d'états liés à Majorana. La non-localité les immunise à la diffusion locale et désormais on prévoit des temps de cohérence prolongés. La décohérence est l'une des plus grandes barrières sur la façon de réaliser un ordinateur quantique à grande échelle et ces états immunitaires sont donc considérés comme de bons candidats pour un bit quantique.

La découverte de l'effet de Rashba géant dans des cristaux en vrac tels que BiTeI [38] et ferroélectrique GeTe [39] et dans un certain nombre de système à faible dimension promettent de créer des dispositifs opérant des spins d'électrons à l'échelle nanométrique et possédant des temps de fonctionnement courts.

I.2. Modèle de Stoner

I.2.1 La séparation spontanée de spin

Le moment magnétique par atome de fer à l'état solide s'élève à $2.2 \mu_B$. La valeur non intégrale démontre qu'une description avec des moments magnétiques localisés échoue. Cette situation peut être décrite par bande ou par ferromagnétisme itinérant caractérisé par une aimantation due à un décrochage spontané de spin des bandes de valence.

Une approche pour l'explication est donnée par la théorie des champs moléculaires. Tous les spins sont influencés par un champ moyen identique λM qui est causé par tous les autres électrons. D'une part, le champ moléculaire magnétise le gaz d'électrons au paramagnétisme de Pauli. D'autre part, l'aimantation résultante est responsable du domaine moléculaire.

Une approche plus prometteuse repose sur le fait que la nature essaie de minimiser l'énergie. Ainsi, nous devons chercher s'il est possible de diminuer l'énergie d'un système s'il devient ferromagnétique sans appliquer de magnétisme externe. Cette situation peut être réalisée par un déplacement d'électrons à la surface de bandes Fermi de spin down en spin up. Cela signifie que les spins down électrons avec des énergies entre $E_F - \delta E$ et E_F doit effectuer un spin - up et sont ensuite intégré dans une bande de spin up avec des énergies entre $E_F + \delta E$ et E_F (voir figure I. 2.1). Le gain d'énergie par électron s'élève à δE et le Nombre d'électrons étant déplacés à $1/2g(E_F)\delta E$. Ainsi, l'augmentation de l'énergie cinétique est donnée par:

$$\Delta E_{kin} = \frac{1}{2}g(E_F)(\delta E)^2 \quad (I.8)$$

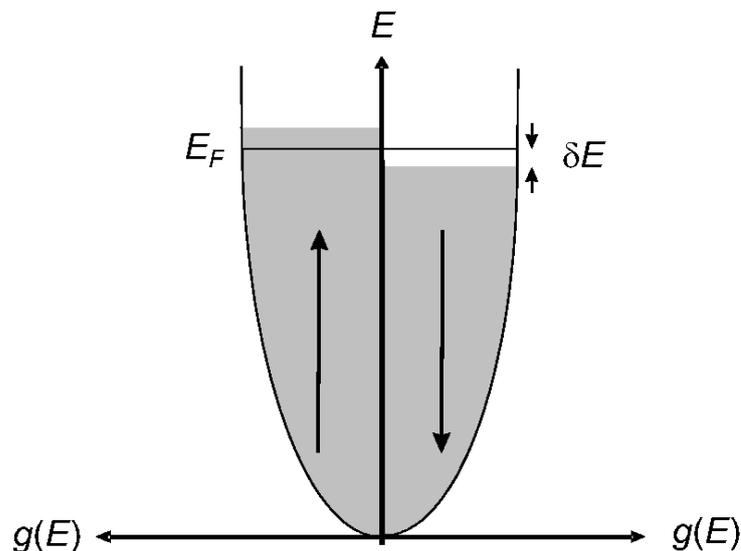


Figure. I. 2.1. Densité d'états pour spin up et spin down des électrons présentant un spin faire tourner spontané sans appliquer un champ magnétique externe.[40]

Cette situation ne semble pas favorable mais il est possible que l'augmentation de l'énergie cinétique est surcompensée en raison de l'échange de l'aimantation avec le domaine moléculaire comme montré dans ce qui suit. Après le spin up le nombre d'électrons spin up et spin down sont donnés par:

$$n_{\uparrow} = \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}g(E_F)\delta E \quad (\text{I.9})$$

$$n_{\downarrow} = \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}g(E_F)\delta E \quad (\text{I.10})$$

Avec n le nombre d'électrons à l'énergie de Fermi dans le cas paramagnétique. Parce que chaque électron porte un moment magnétique de μ_{β} l'aimantation peut s'écrire comme suit:

$$M = \mu_{\beta}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \quad (\text{I.11})$$

L'énergie potentielle ou moléculaire est de:

$$\begin{aligned} \Delta E_{pot} &= -\frac{1}{2}\mu_0 M \cdot \lambda m \\ &= -\frac{1}{2}\mu_0 \lambda M^2 \\ &= -\frac{1}{2}\mu_0 \mu_{\beta}^2 \lambda (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2 \end{aligned} \quad (\text{I.12})$$

Présentation $U = \mu_0 \mu_{\beta}^2 \lambda$ Qui est une mesure de l'énergie coulombienne que nous obtenons:

$$\Delta E_{pot} = -\frac{1}{2}U \cdot (g(E_F)\delta E)^2 \quad (\text{I.13})$$

La variation totale de l'énergie s'élève à:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E_{kin} + \Delta E_{pot} \\ &= \frac{1}{2}g(E_F)(\delta E)^2 - \frac{1}{2}U(g(E_F)\delta E)^2 \\ &= \frac{1}{2}g(E_F)(\delta E)^2(1 - U \cdot g(E_F)) \end{aligned} \quad (\text{I.14})$$

CHAPITRE 1 : L'EFFET RASHBA ET LE MODELE DE STONER

Par conséquent, un fractionnement de spin spontané est donné pour $E < 0$, c'est-à-dire

$$U \cdot g(E_F) \geq 1 \quad (\text{I.15})$$

Qui est dit le critère de Stoner pour le ferromagnétisme. Valeurs de U , $G(E_F)$ et $U \cdot g(E_F)$ sont représentés sur la Fig. I. 2.2 Pour les 50 premiers éléments.

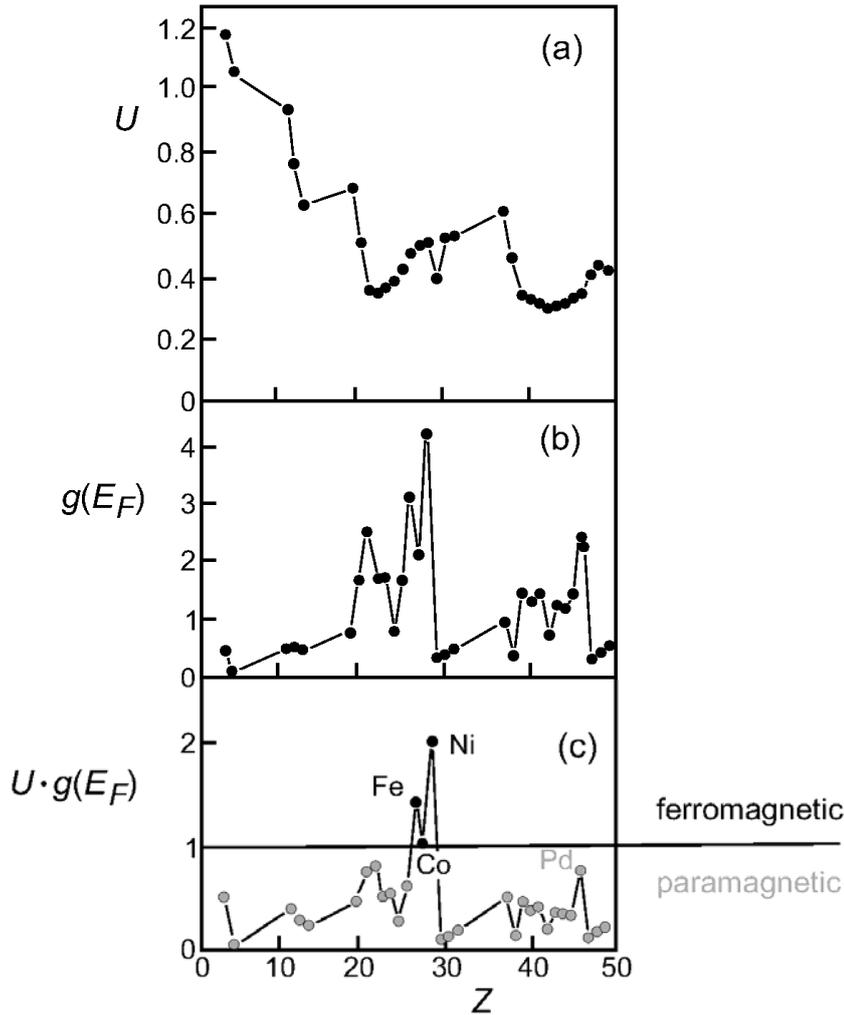


Figure. I.2.2. Valeurs du paramètre de Stoner U , densité d'états par atome $g(E_F)$ à l'énergie de Fermi, et $U \cdot g(E_F)$ en fonction du nombre atomique Z . Seul les éléments **Fe**, **Co** et **Ni** remplissent le critère de Stoner et sont ferromagnétiques. [40]

CHAPITRE 1 : L'EFFET RASHBA ET LE MODELE DE STONER

Nous voir directement que seuls **Fe**, **Co** et **Ni** présentent une valeur de $U \cdot g(E_F) > 1$, Qui est principalement causée par la grande densité d'états directement à l'énergie de Fermi. Si le **critère de Stoner** est atteint, un fractionnement du spin up et spin down bandes par Δ se produit sans appliquer un champ magnétique externe. Cette valeur Δ représente le fractionnement d'échange. Pour $U \cdot g(E_F) < 1$, aucune magnétisation spontanée mais la susceptibilité magnétique peut être différente a partir de la valeur paramagnétique. Dans ce qui suit ce changement de la susceptibilité magnétique est discuté en tenant compte d'un domaine magnétique appliqué et de l'inter- actes. Le changement d'énergie résultant induit une aimantation:

$$M = \mu_\beta(n_\uparrow - n_\downarrow) = \mu_\beta g(E_F) \delta E \quad (I.16)$$

Le décalage énergétique total correspond à:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2} g(E_F) (\delta E)^2 (1 - U \cdot g(E_F)) - MB \\ &= \frac{M^2}{2\mu_\beta^2 g(E_F)} (1 - U \cdot g(E_F)) - MB \end{aligned} \quad (I.17)$$

Le minimum est atteint pour $\partial \Delta E / \partial M = 0$:

$$\frac{M}{\mu_\beta^2 g(E_F)} \cdot (1 - U \cdot g(E_F)) - B = 0 \quad (I.18)$$

Qui conduit à:

$$M = B \cdot \frac{\mu_\beta^2 g(E_F)}{1 - U \cdot g(E_F)} \quad (I.19)$$

Ainsi, on peut calculer la susceptibilité d'être:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\mu_0 M}{B} \\ &= \frac{\mu_0 \mu_\beta^2 g(E_F)}{1 - U \cdot g(E_F)} \\ &= \frac{\chi_{pauli}}{1 - U \cdot g(E_F)} \end{aligned} \quad (I.20)$$

C'est-à-dire $\chi > \chi_{\text{pauli}}$ en raison de l'interaction de Coulomb. Cette situation s'appelle Stoner renforcement. Un exemple est donné pour Palladium. Pour cet élément, le critère de Stoner est non rempli, mais $U \cdot g(E_F)$ est sensiblement plus grand que zéro (voir **figure I.2.2c**). Ainsi, il présente une susceptibilité accrue de Pauli. En d'autres termes **Pd** est presque ferromagnétique. Les propriétés d'un ferromagnétique itinérant ou de bande sont illustrées à titre d'exemple pour **Fe**. La densité calculée des états (DOS) sans fractionnement d'échange.

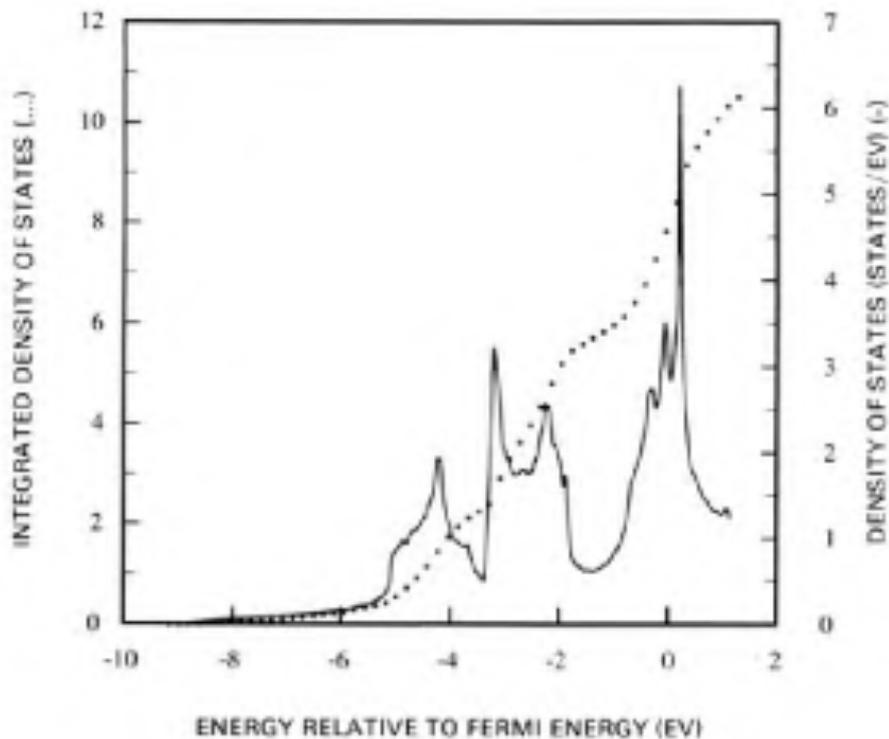


Figure. I.2.3. Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect à l'énergie de Fermi E_F , pour Fe en négligeant le fractionnement d'échange, c'est-à-dire pour le paramètre Situation agnostique [40]

(C'est-à-dire pour le cas paramagnétique) est représenté sur la **Fig.I. 2.3**. Un DOS élevé se produit directement à l'énergie de Fermi E_F , c'est-à-dire que le ferromagnétisme semble probable en raison du **critère de Stoner**. En comparaison, le DOS de **Pd** (voir **figure I.2.4**) présente une grande amplitude qui indique un comportement quasi magnétique. Une situation très différente est présente pour les métaux nobles comme le **Cu** (voir **figure I.2.5**). Le faible DOS à E_F , indique un élément non magnétique.

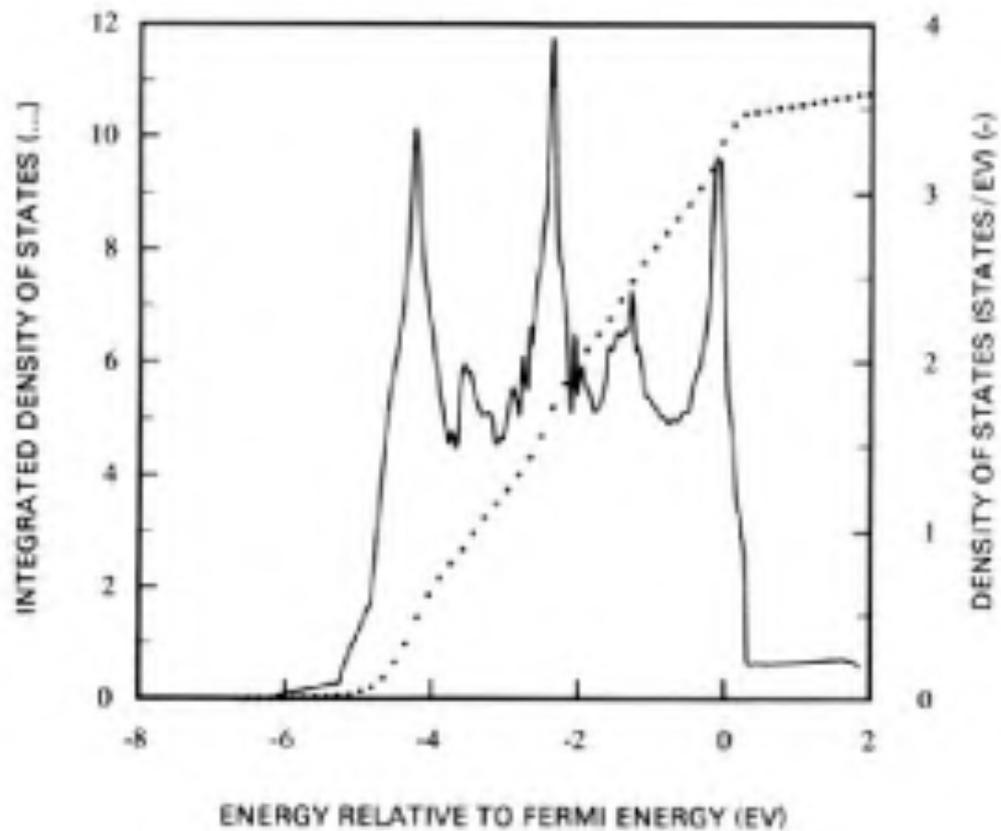


Figure.I. 2.4. Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect a l'énergie de Fermi E_F pour Pd qui présente également une grande valeur à E_F par rapport à Fe [40]

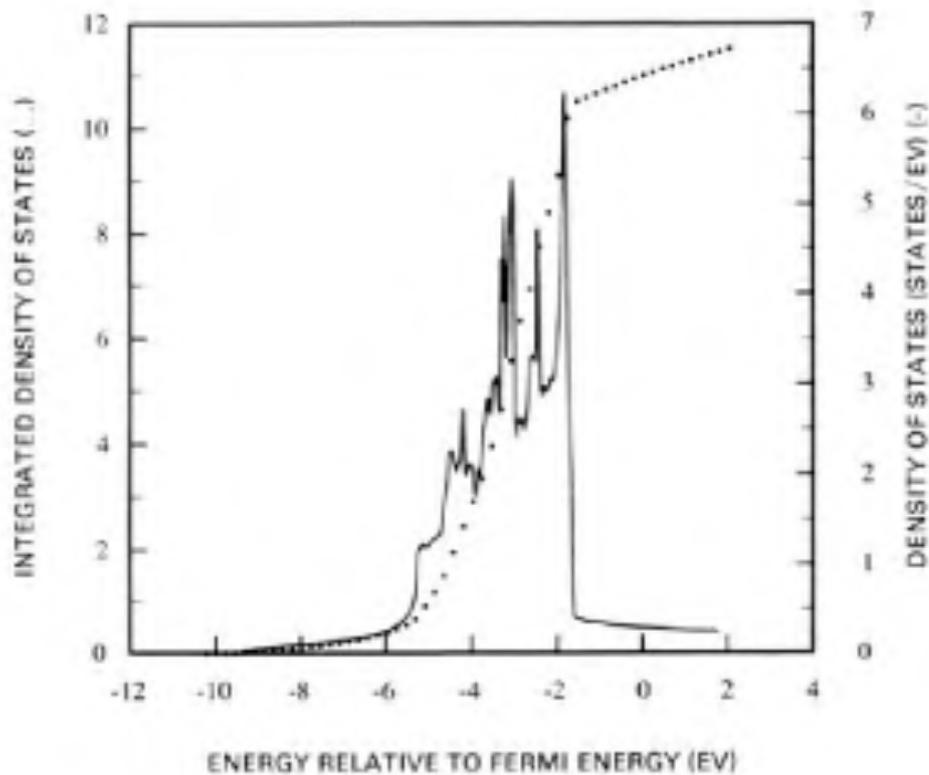


Figure.I. 2.5. Calcul de la densité des états en fonction de l'énergie avec respect à l'énergie de Fermi E_F pour le métal noble Cu. Aucun état d n'est présent chez E_F qui Entraîne une petite amplitude du DOS total. [40]

En tenant compte des résultats de fractionnement d'échange dans un DOS résolu par spin qui se comporte différemment pour les électrons majoritaires (illustrés par exemple pour **Fe**: up-par courbe dans la partie gauche de la **Fig. I.2.6**) et des électrons minoritaires (courbe inférieure dans la partie gauche de la **Fig. I.2.6** pour **Fe**). En raison du changement de direction deux propriétés deviennent importantes. Tout d'abord, le nombre de juges majoritaires et mineurs, les électrons directement à l'énergie de Fermi n'est plus identique. Deuxièmement, plus les électrons majoritaires en dessous de E_F sont présents que les électrons minoritaires. La structure de bande résolue par spin (partie droite de la **figure I. 2.6**) montre directement le fractionnement d'échange des bandes à caractère majoritaire (points sombres) et caractère minoritaire (points lumineux). À titre d'exemple, nous voyons qu'une bande majoritaire traverse l'énergie de Fermi le long de Γ -**H** également connue sous le nom de direction Δ qui correspond au plan **Fe (100)**. Ce croisement peut être sondé directement en utilisant, par exemple, spectrométrie photo-électronique de résolution de spin.[40]

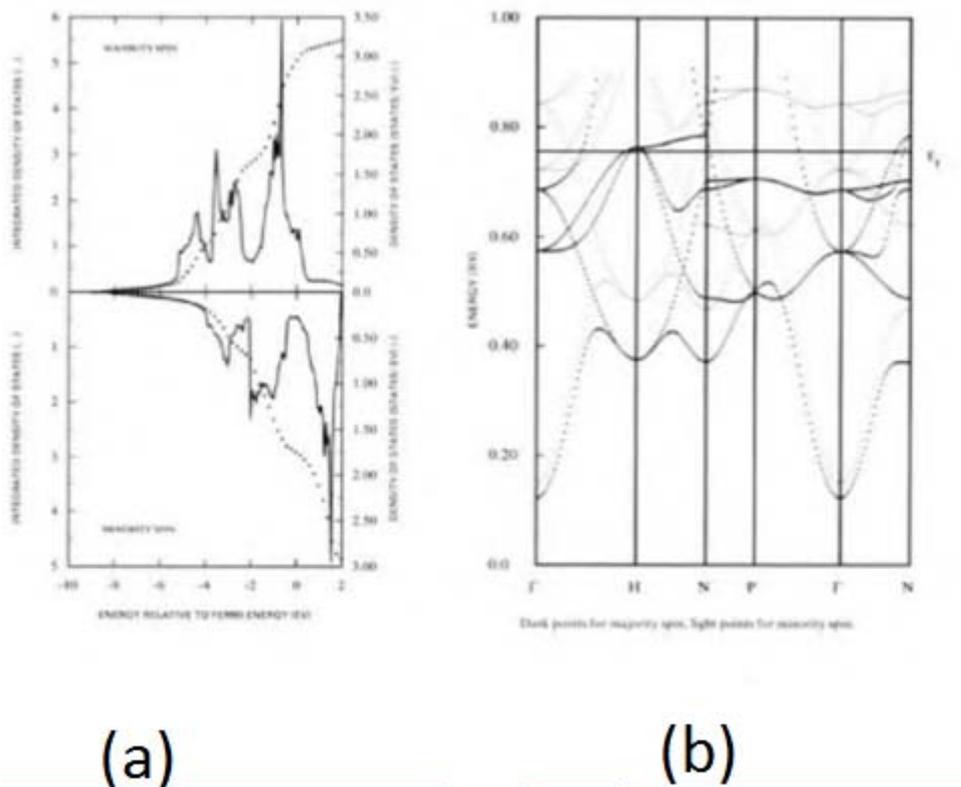


Figure. I .2.6. (a): de la densité d'états décomposée en spin en fonction d'énergétique par rapport à l'énergie de Fermi E_F pour **Fe** en tenant compte de l'échange scission. (b): Structure de bande résolue calculée du spin de **Fe**. Les bandes majoritaires sont Caractérisées par des points sombres, des bandes minoritaires par des points lumineux. [40]

I.2.2. Les métaux, les électrons itinérants, Et la possibilité de Ferromagnétisme :

On a:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger + \frac{U}{2} \int d^3r a_\sigma^\dagger(r) a_\sigma^\dagger(r) a_\sigma(r) a_\sigma(r) \quad (I.21)$$

Nous nous discuter les résultats d'un champ moyen (Stoner) pour les électrons itinérants, puis le reste de ce chapitre discuter des obstacles à La réalisation de cette théorie des champs moyens, découverte des conditions dans la théorie de Stoner est pour Systèmes réels.

I.2.2.1. Théorie des champs moyens: l'instabilité des Stoner

Avant d'écrire la description de la théorie des champs moyens de la transition, il est commode de réorganiser la partie interaction de l'équation (I.21), en utilisant le, Alors:

$$H_{int} = U \int d^3r n_{\uparrow}(r)n_{\downarrow}(r) = \frac{U}{4} \int d^3r [(n_{\uparrow}(r)+n_{\downarrow}(r))^2 - (n_{\uparrow}(r)-n_{\downarrow}(r))^2] \quad (I.22)$$

On peut ainsi considérer le second terme comme le gain d'énergie associé avec le ferromagnétisme.

Utilisation d'un découplage de champ moyen - c'est-à-dire écriture :

$$x = x - \langle x \rangle + \langle x \rangle \quad (I.23)$$

$$x^2 \simeq \langle x \rangle^2 + 2\langle x \rangle(x - \langle x \rangle) + \mathcal{O}[(x - \langle x \rangle)^2] = 2x\langle x \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (I.24)$$

Où nous avons négligé le petit terme de fluctuation, nous pouvons décomposer notre *Hamiltonien* en supposant un paramètre d'ordre :

$$m = \frac{1}{2} \langle n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \rangle \quad (I.25)$$

Et donc :

$$H = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \sigma m U) a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + V U m^2 \quad (I.26)$$

Où V est le volume du système. Nous étudions ensuite les conditions dans une solution auto-cohérente de l'équation (I.22) et l'équation (I.26) existent (autres que la solution toujours présentem = 0). Pour avoir $m \neq 0$, nous avons besoin que les potentiels chimiques n_{\uparrow} , n_{\downarrow} soient différents, donc nous considérons une solution dans laquelle les potentiels chimiques pour les deux spins diffèrent par δ , alors :

$$n_{\uparrow\downarrow} = \int_0^{\epsilon_F \pm \delta} d\epsilon \rho(\epsilon) \simeq n_0 \pm \rho(\epsilon_F) \delta \quad (I.27)$$

Puis, considérant l'énergie totale de cet état comme:

$$\begin{aligned} \frac{E}{V} &= \sum_{\delta} \int_0^{\epsilon_F \pm \delta} d\epsilon (\epsilon - \sigma m U) \rho(\epsilon) + U m^2 \\ &\simeq \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \rho(\epsilon) + \int_0^{\delta} dx (x - U m) \rho(\epsilon_F + x) dx + U m^2 \\ &\simeq \text{const} + (\delta^2 - 2U m \delta) \rho(\epsilon_f) + U m^2 \end{aligned} \quad (I.28)$$

$$const + \frac{m^2}{\rho(\epsilon_F)} - Um^2 \quad (I.29)$$

Dans la dernière ligne, nous avons utilisé la condition d'auto-consistance relative m et δ de l'équation (I.28). Il est donc clair que la condition pour que l'état $m = 0$ devient instable, et donc remplacé par l'état $m \neq 0$ est que $U\rho(\epsilon_F) > 1$. [41]

I.2.3. Théorie des champs moyens de Stoner du modèle Hubbard

Un problème de la théorie de Bloch est le traitement insuffisant du criblage de l'interaction de Coulomb. Le modèle qui intègre l'interaction de Coulomb filtrée de la manière la plus simple possible est le modèle d'Hubbard. Il est décrit par l'hamiltonien

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} \quad (I.30)$$

Il ne conserve que la partie locale de l'interaction de Coulomb, ce qui est une approximation raisonnable si la longueur de criblage r_{scr} dans le potentiel coulombé (Yukawa)

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-r/r_{scr}}}{r} \quad (I.31)$$

Est de l'ordre de la constante du réseau. C'est le cas des bons métaux, c'est-à-dire des métaux à forte densité d'états à l'énergie de Fermi. L'état exact du modèle Hubbard n'est pas connu, sauf dans une dimension, où il peut être obtenu par le Bethe ansatz. Nous devons donc nous fier aux approximations. Le plus simple est le découplage du champ moyen de l'interaction, que nous considérerons maintenant pour $\mathbf{T} = \mathbf{0}$. On peut également obtenir les mêmes résultats d'un ansatz variationnel en termes de déterminants de Slater, distincts cependant de la théorie de Bloch en ce que Une interaction Coulomb filtrée à courte portée est considérée. Nous réécrivons d'abord l'hamiltonien comme :

$$\begin{aligned} H &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} \\ &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma_1\sigma_2} a_{i\sigma_1}^+ a_{i\sigma_2}^+ a_{i\sigma_2} a_{i\sigma_1} \end{aligned} \quad (I.32)$$

Où nous avons utilisé que $a_{i\sigma}a_{i\sigma} = 0$. Cette forme apparemment plus compliquée de H sera pratique plus tard. Dans k -espace nous avons

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{q \neq 0} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_2 \sigma_2} a_{k_1 q \sigma_1} \quad (I.33)$$

Pourquoi $q = 0$ est exclu? L'interaction est découplée dans l'approximation de Hartree-Fock,

$$\begin{aligned} a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_2 \sigma_2} a_{k_1 \sigma_1} &\cong \langle a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} \rangle a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_2 \sigma_2} + a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} \langle a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_2 \sigma_2} \rangle \\ &> - \langle \dots \rangle \langle \dots \rangle - \langle a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_2 \sigma_2} \rangle a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_1 \sigma_1} - a_{k_1+q, \sigma_1}^+ a_{k_2 \sigma_2} \langle a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_1 \sigma_1} \rangle \\ & a_{k_2-q, \sigma_2}^+ a_{k_1 \sigma_1} > + \langle \dots \rangle \langle \dots \rangle \end{aligned} \quad (I.34)$$

Puisque nous nous intéressons à l'ordre ferromagnétique, nous ne considérons que les solutions homogènes. Alors, avec $q \neq 0$, Nous avons $\langle \dots \rangle = 0$ etc. et tout le premier terme (Hartree) disparaît. Le deuxième (Fock) terme est non-nul si $k_1 + q = k_2$ et $\sigma_1 = \sigma_2$. Ainsi

$$H \cong H_{\text{stoner}} := \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \frac{U}{2N} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_1 \neq k_2}} \sum_{\sigma} (n_{k_2 \sigma} a_{k_1 \sigma}^+ a_{k_1 \sigma} + n_{k_1 \sigma} a_{k_2 \sigma}^+ a_{k_2 \sigma} - n_{k_1} n_{k_2}) \quad (I.35)$$

Avec :

$$n_{k\sigma} := \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle \quad (I.36)$$

La restriction $k_1 \neq k_2$ devient non pertinente pour N . En indiquant le nombre total moyen d'électrons spin- σ par $N_{\sigma} := \sum_k n_{k\sigma}$, on a

$$\begin{aligned} H_{\text{stoner}} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \frac{U}{N} \sum_{k\sigma} N_{\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{U}{2N} N_{\sigma}^2 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \frac{U}{2N} \sum_k [(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}) \\ &+ (N_{\uparrow} + N_{\downarrow})(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow})] + \frac{U}{4N} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 + (N_{\uparrow} + N_{\downarrow})^2 \end{aligned} \quad (I.37)$$

Maintenant nous supposons un nombre entier fixe d'électrons

$$Ne := N_{\uparrow} + N_{\downarrow} \quad (I.38)$$

On peut donc remplacer l'opérateur $\sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}$ par Ne

$$\begin{aligned} H_{\text{stoner}} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \frac{U}{2N} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) \sum_k (a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}) + \frac{U}{4N} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{4N} Ne^2 = \\ & \sum_{k\sigma} \left[\epsilon_k - \sigma \frac{U}{2N} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) \right] a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{U}{4N} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{4N} Ne^2. \end{aligned} \quad (I.39)$$

Nous définissons

$$K_\beta \vartheta := \frac{Ne}{2N} U \quad (\text{I.40})$$

Cette quantité est évidemment la fraction de remplissage multipliée par la force d'interaction de Coulomb. Alors

$$H_{\text{stoner}} = \sum_{k\sigma} \left[\epsilon_k - \sigma K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right] a_{k\sigma} + \frac{K_\beta \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \vartheta}{2} Ne^2 \quad (\text{I.41})$$

Ce Hamiltonien définit le modèle de Stoner. H_{stoner} Décrit des électrons dans un champ effectif $B_{\text{eff}} = 2/(g\mu_\beta) K_\beta \vartheta (N_\uparrow - N_\downarrow)/Ne$

Ce champ ou la polarisation $(N_\uparrow - N_\downarrow)/N_e$ doit être déterminé de manière autonome. Dans l'état fondamental, cela est fait en minimisant l'énergie

$$E = \langle H_{\text{stoner}} \rangle = N \int_{-\infty}^{E_F} d\epsilon \epsilon D \left(\epsilon + \sigma K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) + N \int_{-\infty}^{E_F} d\epsilon \epsilon D \left(\epsilon - \sigma K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) + \frac{K_\beta \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \vartheta}{2} Ne^2 \quad (\text{I.42})$$

Où $D(\epsilon) = m^{3/2}/(\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3) \sqrt{\epsilon} \theta(\epsilon)$ Est la densité d'états par direction de spin et par site du gaz électron libre tridimensionnel.

Avec

$$E_{F\sigma} := E_F + \sigma K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \quad (\text{I.43})$$

On obtient

$$\begin{aligned} E &= N \int_{-\infty}^{E_{F\uparrow}} d\epsilon \left(\epsilon - \sigma K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) D(\epsilon) \\ &+ N \int_{-\infty}^{E_{F\downarrow}} d\epsilon \left(\epsilon + K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) D(\epsilon) + \frac{K_\beta \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \vartheta}{2} Ne^2. \\ &= N \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{15} \left[E_{F\uparrow}^{3/2} \left(3E_{F\uparrow} - 5K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) + E_{F\downarrow}^{3/2} \left(3E_{F\downarrow} + 5K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) \right] + \frac{K_\beta \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \vartheta}{2} Ne^2 \quad (\text{I.44}) \end{aligned}$$

De plus, les nombres d'électrons sont

$$N_\sigma = N \int_{-\infty}^{E_F} d\epsilon \epsilon D \left(\epsilon + K_\beta \vartheta \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)}{Ne} \right) = N \int_0^{E_{F\sigma}} d\epsilon \epsilon D(\epsilon) = N \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{3} E_{F\sigma}^{3/2} \quad (\text{I.45})$$

Notons que dans l'état paramagnétique, nous avons

$$Ne = 2N \int_0^{E_F^{para}} d\epsilon \epsilon D = N \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{4}{3} (E_F^{para})^{3/2} \quad (\text{I.46})$$

De sorte que nous pouvons écrire, maintenant dans l'état ferromagnétique,

$$N_\sigma = \frac{Ne}{2} \frac{E_{F\sigma}^{3/2}}{(E_F^{para})^{3/2}} \quad (\text{I.47})$$

Cela implique

$$E_{F\sigma} = E_F^{para} \left(\frac{2N_\sigma}{Ne} \right)^{2/3} \quad (\text{I.48})$$

ET

$$E_F = \frac{E_{F\uparrow} E_{F\downarrow}}{2} = \frac{E_F^{para}}{2^{1/3}} \left[\left(\frac{N_\uparrow}{Ne} \right)^{3/2} + \left(\frac{N_\downarrow}{Ne} \right)^{3/2} \right] \quad (\text{I.49})$$

En insérant ceci dans E, nous obtenons

$$E = \frac{3}{4} \frac{Ne}{(E_F^{para})^{3/2}} \left[\frac{2}{5} (E_F^{para})^{5/2} 2^{5/3} \left(\left(\frac{N_\uparrow}{Ne} \right)^{5/3} + \left(\frac{N_\downarrow}{Ne} \right)^{5/3} \right) - \frac{2}{3} \frac{2}{Ne} E_F^{para 3/2} \frac{(N_\uparrow - N_\downarrow)^2}{Ne} \right] + \frac{k_\beta \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \vartheta}{2} Ne \quad (\text{I.50})$$

Ainsi, l'énergie par électron est

$$\frac{E}{Ne} = \frac{3}{5} 2^{2/3} E_F^{para} \left[\left(\frac{N_\uparrow}{Ne} \right)^{5/3} + \left(\frac{N_\downarrow}{Ne} \right)^{5/3} \right] - k_B \theta \left(\frac{N_\uparrow}{Ne} - \frac{N_\downarrow}{Ne} \right)^2 + \frac{k_B \theta}{2} \left(\frac{N_\uparrow}{Ne} - \frac{N_\downarrow}{Ne} \right)^2 \quad (\text{I.51})$$

Défaillance de la polarisation

$$\zeta := \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{Ne} \quad (\text{I.52})$$

Nous trouvons

$$\frac{N_\uparrow}{Ne} = \frac{1+\zeta}{2} \quad \text{Et} \quad \frac{N_\downarrow}{Ne} = \frac{1-\zeta}{2}$$

L'énergie par électron lit alors

$$\begin{aligned} \frac{E}{N_e} &= \frac{3}{5} 2^{2/3} E_F^{para} \left[\left(\frac{1+\zeta}{2} \right)^{5/3} + \left(\frac{1-\zeta}{2} \right)^{5/3} \right] - \frac{k_B \theta}{2} \zeta^2 - \frac{k_B \theta}{2} \\ &= \frac{3 E_F^{para}}{5} \left[(1+\zeta)^{5/3} + (1-\zeta)^{5/3} \right] - \frac{k_B \theta}{2} \zeta^2 - \frac{k_B \theta}{2} \end{aligned} \quad (I.53)$$

On trouve un minimum local non aux bords ($\zeta = \pm 1$) à partir de la dérivée,

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \zeta N_e} = \frac{E_F^{para}}{2} \left[(1+\zeta)^{2/3} + (1-\zeta)^{2/3} \right] - k_B \theta \zeta \quad (I.54)$$

Qui conduit à

$$\frac{k_B \theta}{E_F^{para}} \zeta = \frac{(1+\zeta)^{2/3} - (1-\zeta)^{2/3}}{2} \quad (I.55)$$

Notez que l'expression de droite a pente 2/3 à $\zeta = 0$ On trace les deux côtés de cette équation:

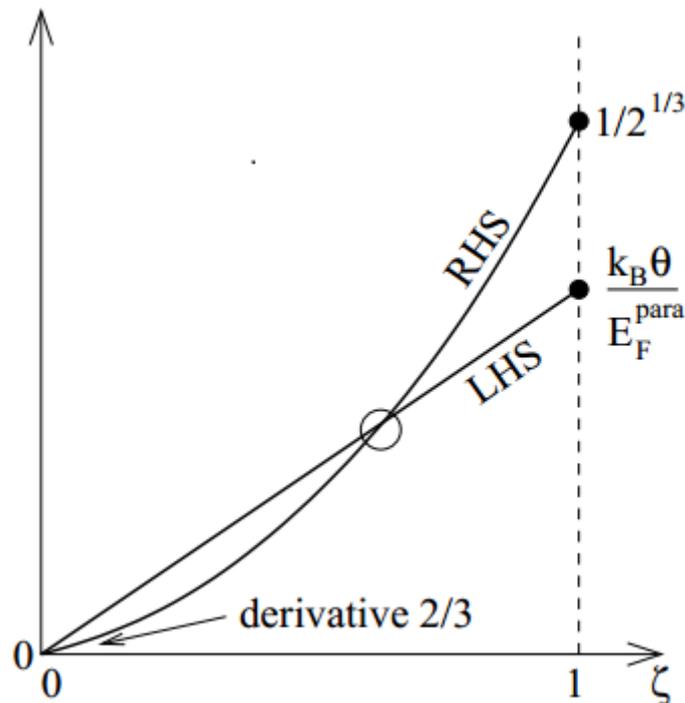


Figure. I .2.7: Magnétisme en fonction de $\frac{k_B \theta}{E_F^{para}}$ [42]

CHAPITRE 1 : L'EFFET RASHBA ET LE MODELE DE STONER

Il y a trois cas:

1. Pour $\frac{k_B\theta}{E_F^{para}} < 2/3$ pas d'intersection pour, la seule solution est $\zeta \neq 0$, état non magnétique,
2. $2/3 < \frac{k_B\theta}{E_F^{para}} < 1/2^{1/3}$: Intersection pour $0 < |\zeta| < 1$, état ferromagnétique partiellement polarisé,
3. Pour $\frac{k_B\theta}{E_F^{para}} < 1/2^{1/3}$: On peut voir de $\frac{E}{N_e}$ Que l'énergie a un minimum au bord $|\zeta|=1$; La dérivée ne disparaît pas là. Il s'agit d'un état ferromagnétique complètement polarisé, c'est-à-dire seulement Spin- "sont présents.

La condition de l'ordre ferromagnétique, qu'elle soit partielle ou complète,

$$\frac{k_B\theta}{E_F^{para}} > 2/3$$

Avec :

$$k_B\theta = N_e/(2N)U, D(E_F^{para}) = m^{\frac{3}{2}}/(\sqrt{2}\pi^2\hbar^3)\sqrt{E_F^{para}}$$

Et:

$$N_e N m^{\frac{3}{2}} (\sqrt{2}\pi^2\hbar^3) / 3 (E_F^{para})^{\frac{3}{2}}$$

Nous pouvons réécrire ceci comme :

$$\left(\frac{N_e}{2N}U\right) / \left(\frac{3}{4N} \frac{N_e}{D(E_F^{para})}\right) = \frac{2}{3} D(E_F^{para})U > 2/3$$

Et donc comme l'inégalité très compacte $D(E_F^{para})U > 1$. C'est le fameux critère de Stoner pour l'occurrence de l'ordre ferromagnétique dans le modèle d'Hubbard. Elle est essentiellement indépendante de la répartition de la dispersion tant que la densité d'états appropriée est utilisée. Notez que le ferromagnétisme se produit pour des interactions fortes.

CHAPITRE 1 : L'EFFET RASHBA ET LE MODELE DE STONER

Il y a des exemples pour les trois cas dans les composés réels :

1. Platinum appartient juste au premier cas | L'interaction Coulomb locale est assez forte mais pas assez forte pour causer le ferromagnétisme. 2. Les métaux ferromagnétiques de transition fer, cobalt et nickel appartiennent à ce cas. Il faut garder à l'esprit que le modèle sous-jacent Hubbard est une caricature de matériaux réels, si. 3. Les composés CrO_2 et EuB_6 sont des métaux ferromagnétiques complètement polarisés. [42]

Chapitre II
Calcul
Théorique

Dans ce chapitre, nous simplifions les deux hamiltoniens Rashba et Stoner, alors on calcule leur somme et en fin nous concluons l'énergie d'électron.

II.1. Calcul de l'hamiltonien total :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{Tot} = \mathbf{H}_R + \mathbf{H}_{STONER} \quad (\text{II.1})$$

On obtient l'équation de Rashba (I.5) : [36]

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_R = & -\alpha_z \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + \text{H. C.} \right) + \alpha_y \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + \right. \\ & \left. \text{H. C.} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

Pour deuxième partie de l'équation (II.1) on utilise l'équation Stoner (I.41) : [42]

$$\mathbf{H}_{stoner} = \sum_{k\sigma} \left(\epsilon_k - \sigma K_\beta \theta \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N_e} \right) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{K_\beta \theta}{2N_e} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_\beta \theta}{2} N_e \quad (\text{II.3})$$

II.1.1 L'hamiltonien de Rashba :

On utilisant le calcul de Rashba pour simplifier le travail

On a l'équation (II. 2) :

$$H_R = -\alpha_z \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + H. C. \right) + \alpha_y \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + H. C. \right)$$

On écrit le terme conjuguée de Rashba tel que :

$$H_R = -\alpha_z \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + C_{J+1,\sigma} (-i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'}^+ \right) + \alpha_y \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(C_{J+1,\sigma}^+ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + C_{J+1,\sigma} (-i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'}^+ \right) \quad (II.4)$$

Pour :

$$\begin{cases} C_{J+1,\sigma} = e^{-i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma} \\ C_{J+1,\sigma}^+ = e^{i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma}^+ \end{cases} \quad (II.5)$$

On remplacer (II.5) dans l'équation(II.2)

$$H_R = -\alpha_z \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(e^{i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma}^+ (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + e^{-i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma} (-i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'}^+ \right) + \alpha_y \sum_{J,\sigma,\sigma'} \left(e^{i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma}^+ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'} + e^{-i\vec{k}\vec{\delta R}} C_{j,\sigma} (-i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} C_{J,\sigma'}^+ \right) \quad (II.6)$$

On utilisant les matrices de Pauli :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (II.7)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (II.8)$$

Et on trouve pour $\sigma \neq \sigma'$:

$$\begin{cases} (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} = \pm 1 \\ (i\sigma_z)_{\sigma\sigma'} = 0 \end{cases} \quad (II.9)$$

On remplace (II .9) dans (II .6)

Dans le cas de champ appliqué selon z :

$$H_R = -\alpha_z \sum_{\substack{J,\sigma,\sigma' \\ \sigma \neq \sigma'}} (\pm 1) \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma} C_{J,\sigma'}^+ \right) \quad (\text{II.10})$$

Dans l'équation (II.2) il y a deux parties, une partie en fonction de α_y suivant y et une partie suivant z de α_z chaque α_y, α_z en fonction de champ électrique E_y, E_z , pour un champ appliqué suivant y ce champ sur le système influence la rotation de spin dans la même position cet état est un thème de recherche scientifique en lui-même ce qui nous a créé une contrainte et nous a obligé de ne pas prendre cette situation en considération dans la présente étude, et on va juste se limiter à étudier le cas de α_y

Pour $\sigma = \sigma'$:

$$\begin{cases} (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} = 0 \\ (i\sigma_z) = \pm i \end{cases} \quad (\text{II.11})$$

On remplace (II.11) dans (II.6)

Et on obtient l'équation de Rashba de champs électrique suivant y on a :

$$H_R = \alpha_y \sum_{\sigma=\sigma'} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma}^+ (\pm i) C_{J,\sigma'} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma} (\mp i) C_{J,\sigma'}^+ \right) \quad (\text{II.12})$$

$$H_R = \pm \alpha_y \sum_{\sigma=\sigma'} \left(i e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma} C_{J,\sigma'}^+ \right) \quad (\text{II.13})$$

$$H_R = \pm \alpha_y \sum_{\sigma=\sigma'} \left(i e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} C_{J,\sigma} C_{J,\sigma'}^+ + i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} \right) \quad (\text{II.14})$$

$$H_R = \pm \alpha_y \sum_{\sigma=\sigma'} \left((i e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} - i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}}) C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} + i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} \right) \quad (\text{II.15})$$

On définit :

$$\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (\text{II.16})$$

Nous remplaçons l'équation (II.16) dans l'équation (II.15)

$$H_R = \mp \alpha_y \sum_{\sigma=\sigma'} \left((2 \sin \vec{k} \cdot \vec{\delta R}) C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} \right) \quad (\text{II.17})$$

On a :

$$ie^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta R}} = i\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) + \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \quad (\text{II.18})$$

On remplace (II.18) dans (II.17)

$$H_R = \mp \alpha_y \left(\left(\sum_{\substack{J,\sigma,\sigma' \\ \sigma=\sigma'}} 2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) \quad (\text{II.19})$$

Alors :

$$H_R = \mp \alpha_y \left(2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \sum_{\substack{J,\sigma,\sigma' \\ \sigma=\sigma'}} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) \quad (\text{II.20})$$

II.1.2. ENERGIE DE RASHBA

On a définie l'équation de Schrödinger :

$$H_R |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle \quad (\text{II.21})$$

Nous remplaçons l'équation (II.20) dans l'équation (II.21) :

$$\mp \alpha_y \left(2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \sum_{\substack{J,\sigma,\sigma' \\ \sigma=\sigma'}} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle \quad (\text{II.22})$$

Alors :

$$E_{k,R} = \mp \langle \alpha_y \rangle (2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) N_e - i\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R})) \quad (\text{II.23})$$

II.2.1 HAMILTONIEN DE STONER :

On obtient l'hamiltonien de modèle de Stoner. H_{Stoner} equation (II. 3):

$$H_{Stoner} = \sum_{k\sigma} \left(\epsilon_k - \sigma K_B \vartheta \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{Ne} \right) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{K_B \vartheta}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{K_B \vartheta}{2} Ne$$

On a:

$$K_B \vartheta = \frac{Ne U}{2N} \quad (II.24)$$

Alors :

$$H_{Stoner} = \sum_{k,\sigma} \left[\epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{2} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{Ne U}{2Ne} (N_\uparrow - N_\downarrow)^2 - \frac{Ne U}{2N} Ne \right] \quad (II.25)$$

Et donnent le nombre entier fixe d'électrons :

$$Ne = N_\uparrow + N_\downarrow \quad (II.26)$$

$$Ne = \sum_{j\sigma} C_{j\sigma}^+ C_{j\sigma} \quad (II.27)$$

Et on écrit le transformateur de l'espace de bloch vers l'espace de waniar :

$$\begin{cases} C_{K\sigma}^+ = \sum_{J,\sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_J} C_{J\sigma}^+ \\ C_{K\sigma'} = \sum_{J',\sigma'} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\vec{R}_{J'}} C_{J'\sigma'} \end{cases} \quad (II.28)$$

Donc :

$$Ne = \sum_{J,\sigma} \frac{1}{N} e^{ik(RJ'-RJ)} C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma'} \quad (II.29)$$

Et on définit:

$$\frac{1}{N} e^{ik(RJ'-RJ)} = \delta_{jj'} \quad (II.30)$$

Alors que l'équation (II.26) il devient:

$$Ne = \sum_{J,\sigma} C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma} \quad (II.31)$$

Donc :

$$H_{\text{stoner}} = \sum_{J\sigma} \epsilon_k C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma} - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} \sum_{J\sigma\sigma'} C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma'} + \frac{Ne U}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{Ne U}{2N} Ne . \quad (\text{II.32})$$

$$H_{\text{stoner}} = \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \sum_{J,\sigma} C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma} \quad (\text{II.33})$$

II.2.2 ENERGIE DE STONER :

On a :

$$H_{\text{stoner}} |\Psi_k\rangle = E_{k,s} |\Psi_k\rangle \quad (\text{II.34})$$

Nous remplaçons l'équation (II.33) dans (II.34) :

$$\left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \sum_{J,\sigma} C_{J\sigma}^+ C_{J\sigma} |\Psi_k\rangle = E_{k,s} |\Psi_k\rangle \quad (\text{II.35})$$

Donc :

$$E_{k,s} = \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] Ne \quad (\text{II.36})$$

II.3.1 HAMILTONIEN TOTAL

L'hamiltonnien total est couplage entre l'hamiltonnien de Rashba et l'hamiltonnien de Stoner comme suivant :

$$H = H_R + H_{stoner}$$

$$H = \mp \alpha_y \left(2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \sum_{J,\sigma,\sigma'} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \sum_{J,\sigma} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma}$$

(II.37)

II.3.2 L'ENERGIE TOTALE

On a :

$$H|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle \quad (II.38)$$

Nous remplaçons l'équation (II.39) dans l'équation (II.40)

$$\mp \alpha_y \left(2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \sum_{J,\sigma,\sigma'} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma'} - i \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \sum_{J,\sigma} C_{J,\sigma}^+ C_{J,\sigma} |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle \quad (II.39)$$

En déduire :

$$E_k = \mp \langle \alpha_y \rangle (2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - i \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R})) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] Ne$$

(II.40)

On divisé l'équation (II.40) sur N_e

$$\frac{E_k}{N_e} = \mp \langle \alpha_y \rangle \frac{1}{N_e} \left(\left(2 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \frac{1}{N_e} i \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \frac{1}{N_e} \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) \right) \right) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{2N} \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{2} + \frac{1}{2N} \frac{U}{2Ne} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \quad (\text{II.41})$$

Car le N_e très grande et $\cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}), [\vec{k} \cdot \vec{\delta R}, -2\pi, 2\pi]$ et $\sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}), [\vec{k} \cdot \vec{\delta R}, -\pi/2, \pi/2]$, on négligé le terme $\frac{1}{N_e} (i \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta R}))$.

On a :

$$\xi = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N} \quad (\text{II.42})$$

$$\frac{E_k}{N_e} = \mp \langle \alpha_y \rangle (2 \sin(K \delta R)) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{4} \xi + \frac{1}{4} \frac{NU}{Ne} \xi^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \quad (\text{II.43})$$

$$\alpha_y = \frac{e E_y}{4mc^2} \quad (\text{II.44})$$

m : Masse effective

$$\frac{E_k}{N_e} = \mp \frac{e}{4mc^2} \langle E_y \rangle (\sin(K \delta R)) + \left[\epsilon_k - \sigma \frac{Ne U}{4} \xi + \frac{1}{4} \frac{NU}{Ne} \xi^2 - \frac{U}{2N} Ne \right] \quad (\text{II.45})$$

On pose :

$$f(\xi) = -\sigma \frac{Ne U}{4} \xi + \frac{1}{4} \frac{NU}{Ne} \xi^2 - \frac{U}{2N} Ne \quad (\text{II.46})$$

En remplaçant l'équation (II.48) dans l'équation (II.47) :

$$\frac{E(x,y)}{N_e} = \mp 2\alpha_y(\sin(K\delta R)) + \epsilon_k + f(\xi) \quad (\text{II.47})$$

L'équation (II.47) est l'équation finale de système couplage de l'effet de Rashba sur le model de Stoner qui présenter l'énergie diviser sur le nombre de site N_e en fonction de coefficient α_y qui contrôler ce système par le champ électrique appliquer sur ce model, et une énergie d'un électron libre avec constante f en fonction le nombre d'electron N et potentiel U et le nombre de site N_e .

Chapitre III
La simulation

L'objectif de ce chapitre est la réalisation de simulation de l'énergie d'électron que calculée dans le chapitre précédent par Mathematica10 et nous allons discuter les résultats.

III.1. Définition de Simulation:

"Méthode de mesure et d'étude consistant à remplacer un phénomène, un système par un modèle plus simple mais ayant un comportement analogue.

Le système ou phénomène analysé peut être schématisé sous forme d'un modèle mécanique, électronique ou logico-mathématique. Nous nous intéresserons ici uniquement à la représentation du système sous la forme d'un modèle informatisable.

L'objectif d'un modèle de simulation peut être simplement descriptif : étudier le comportement d'un système sous différentes hypothèses d'évolution de l'environnement, ou aussi normatif en simulant plusieurs décisions envisagées choisir la meilleure ou la moins mauvaise."[43]

III.2. Les paramètre:

De IIème chapitre on à l'équation (II.47) :

$$\frac{E(x, y)}{N_e} = \mp 2\alpha_y(\sin(K\delta R)) + \epsilon_k + f(\xi)$$

On pose:

$$ak_x = X \implies k_x = \frac{X}{a} \implies k_x^2 = \frac{X^2}{a^2}$$

$$by = Y \implies k_y = \frac{Y}{b} \implies k_y^2 = \frac{Y^2}{b^2}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a^2}(X^2 + Y^2) \quad \text{Telle que: } a \approx b$$

Les unités de SI

$$\hbar^2 [J^2, S^2].$$

$$m [Kg].$$

$$a^2 [m^2].$$

Donc :
$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \left[\frac{J^2}{Kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}} \right]$$

$$[Kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}] \equiv \text{Hamiltoniene} \equiv \text{Lagrangiene}$$

Alors :
$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} \equiv \left[\frac{J^2}{Kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}} \right] \equiv \left[\frac{J \cdot J}{J} \right] \equiv [J]$$

On transférée :

1ev \longrightarrow $1,6 \cdot 10^{-19} J$

A.N :
$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \left[\frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (352,4 \cdot 10^{-12})^2} \right]$$

$$(Ni) : \frac{\hbar^2}{2ma^2} = 7,2 \cdot 10^{-18} J = 45ev$$

$$\frac{E(x, y)}{N_e} = \mp 2\alpha \sin(X + Y) + 45(X^2 + Y^2) + f(\xi)$$

III.3 Représentation schématique : III.3.1 L'effet spin orbite de Rashba:

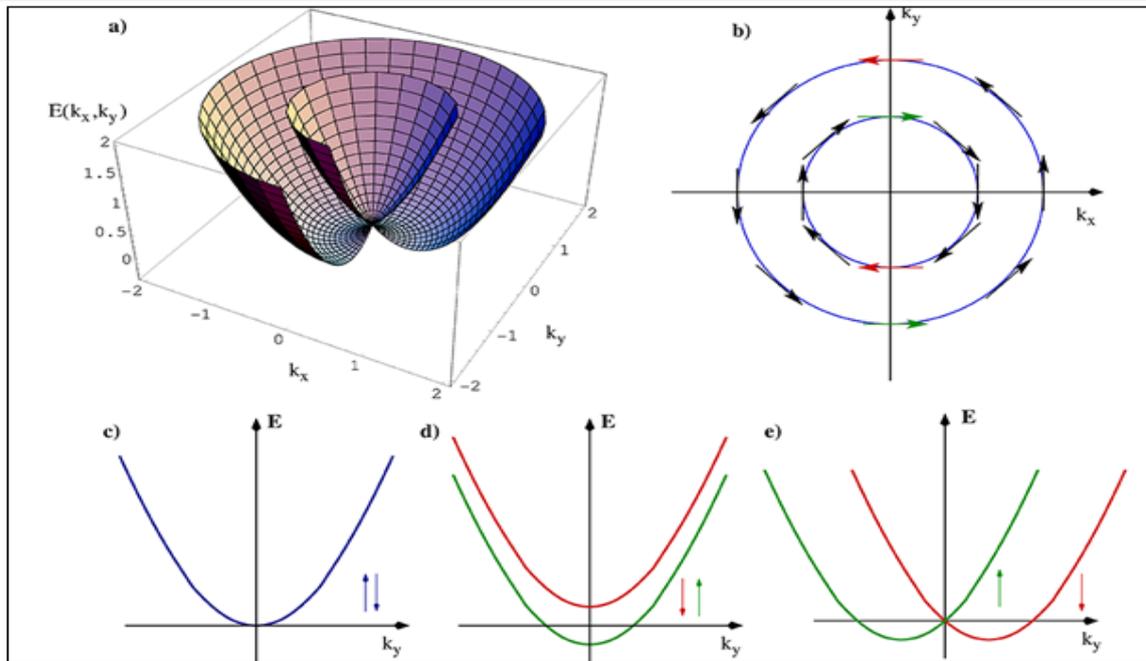


FIGURE.III.1: Propriétés du spectre énergétique de Rashba. Panneau a) Partie du spectre énergétique d'un hamiltonien contenant une interaction Rashba (1.10). Panneau b) Les contours de Fermi relatifs à l'hamiltonien (1.10), les états de rotation sont indiqués. Panneau c) section du spectre énergétique pour un électron libre. Panneau d) section du spectre d'énergie pour un électron en présence d'un champ magnétique (découpage Zeeman). Panneau e) section du spectre d'énergie pour un électron en présence d'orbite-spin de Rashba en interaction. [44]

III.3.2 Le modèle de stoner :

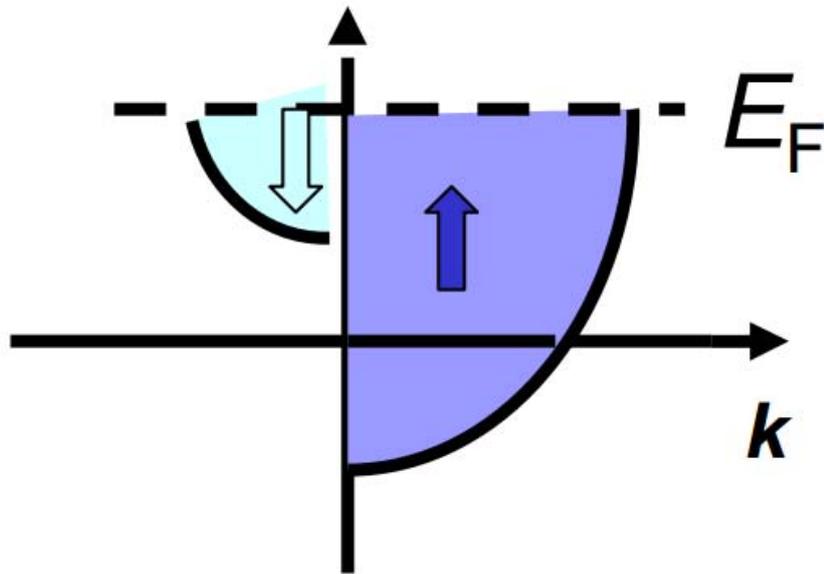


FIGURE.III.2: Représentation schématique du modèle de Stoner. [45]

III.3.3 Système de couplage de l'effet de Rashba sur modèle de stoner :

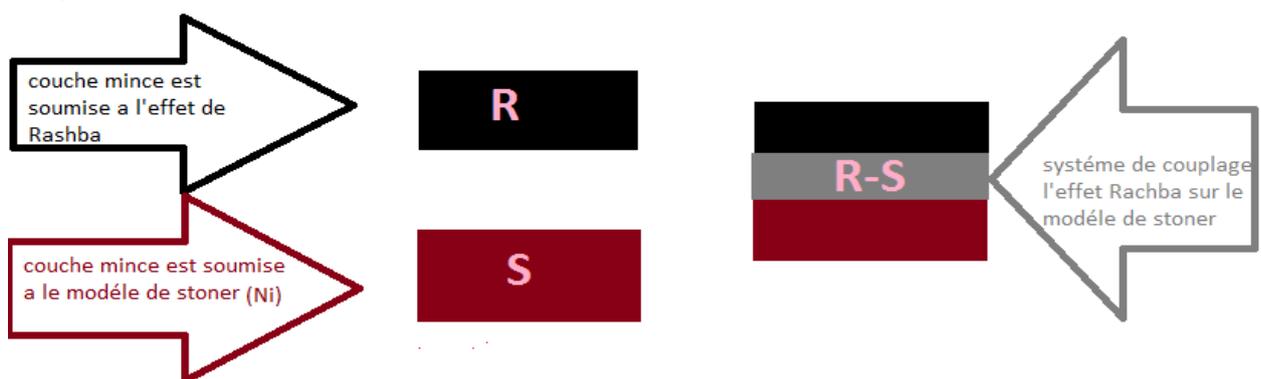


FIGURE.III.3: Schéma représenté le système de couplage effet Rashba sur le modèle de Stoner.

III.4 Les résultats de simulation :

On a deux variables f et α_y , on prendre

- pour $f = 0$ et $\alpha_y = 0$:

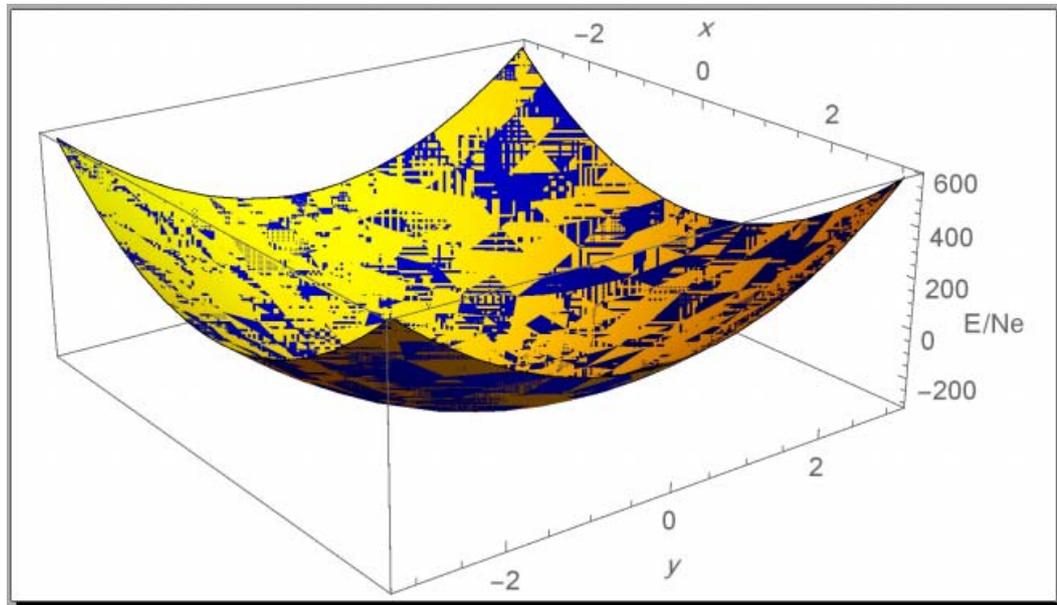


FIGURE.III.4: la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeurs $\alpha_y = 0$, $f=0$.

- Pour $f \neq 0$ et $\alpha_y = 0$:

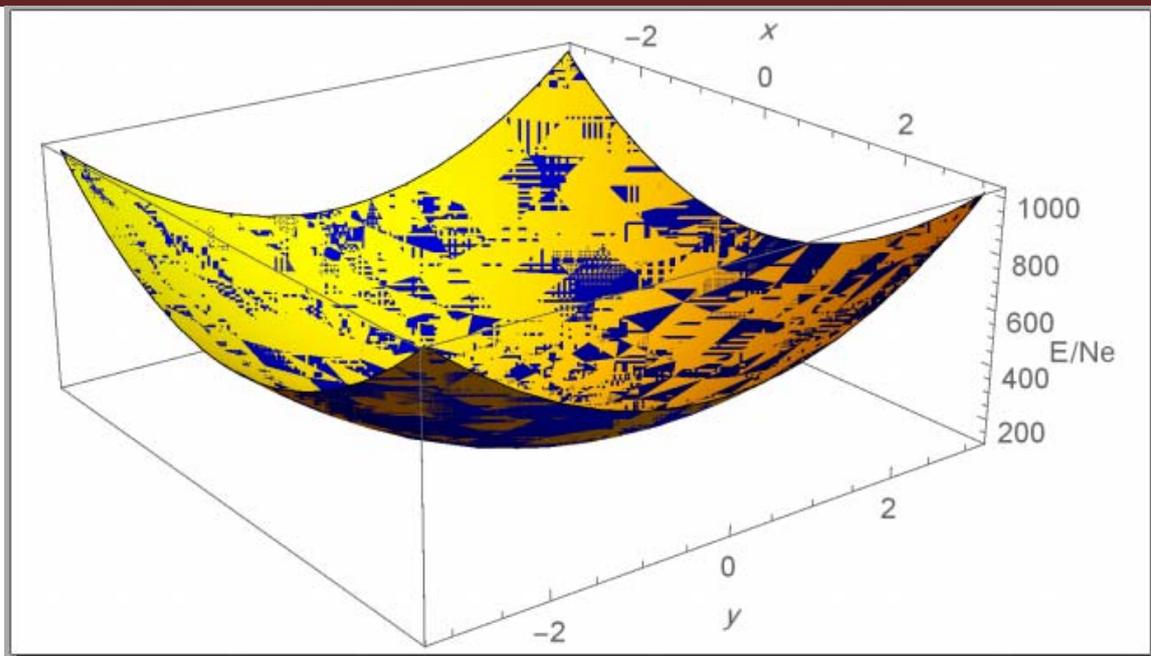


FIGURE.III.5: la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeurs de $\alpha_y = 0$, $f \neq 0$.

Le variable f dans l'équation de couplage est décalé le courbe suivent z .

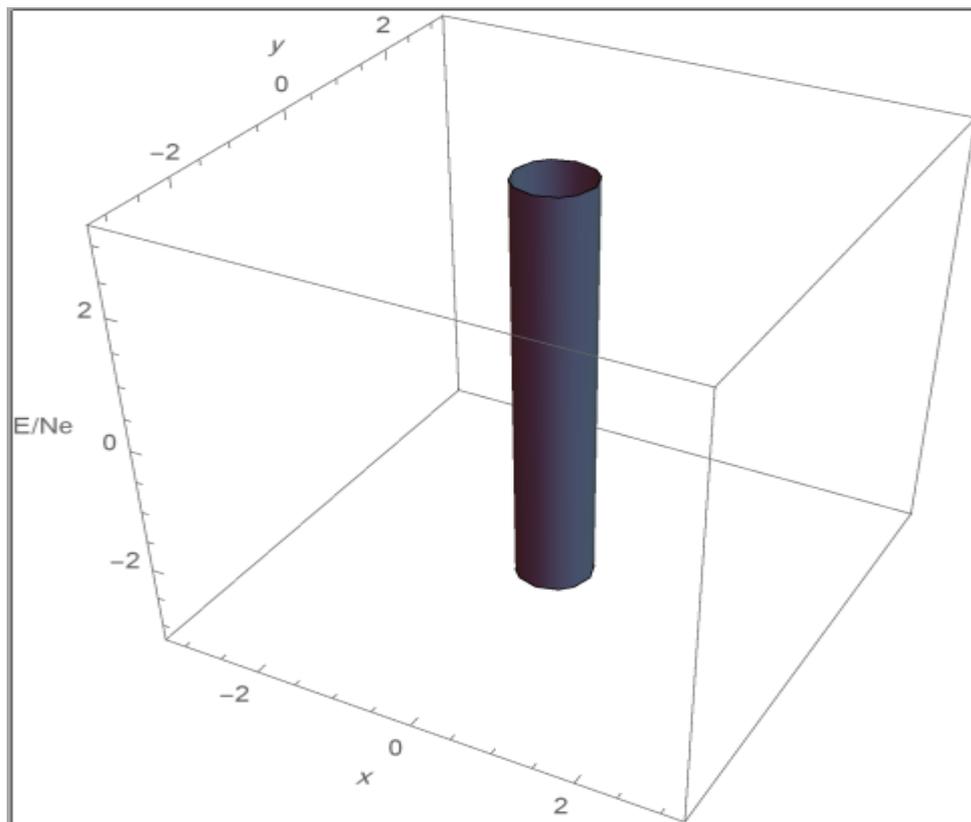


FIGURE.III.6: la figure qui présenter l'énergie de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour $\alpha_y = 0$ (pour une forme cylindrique)

Dans ce cas le système est fonctionné comme un conducteur, on a seulement modèle de Stoner, il n'y a pas un effet de Rashba

On a :

$$\alpha_y = \frac{4mc^2}{e} E_y$$

Pour : $\alpha_y = 0$, $E_y = 0$

Nous concluons que la couche mince (système couplage) c'est une conducteur quand $\alpha_y = 0$ et dans notre recherche nous ne sommes pas intéressés a ce cas pares que elle est logique, tous les matériaux de modèle de stoner (Ni, Co et Fr) sont des conducteur.

Nous intéressons juste a le cas quand $\alpha \neq 0$, c.-à-d. nous intéressons juste a le cas de système de couplage effet Rashba sur le modèle de Stroner.

➤ Pour $\alpha \neq 0$

On prendre des valeurs différent des α .

- Pour: $\alpha_y = 500$

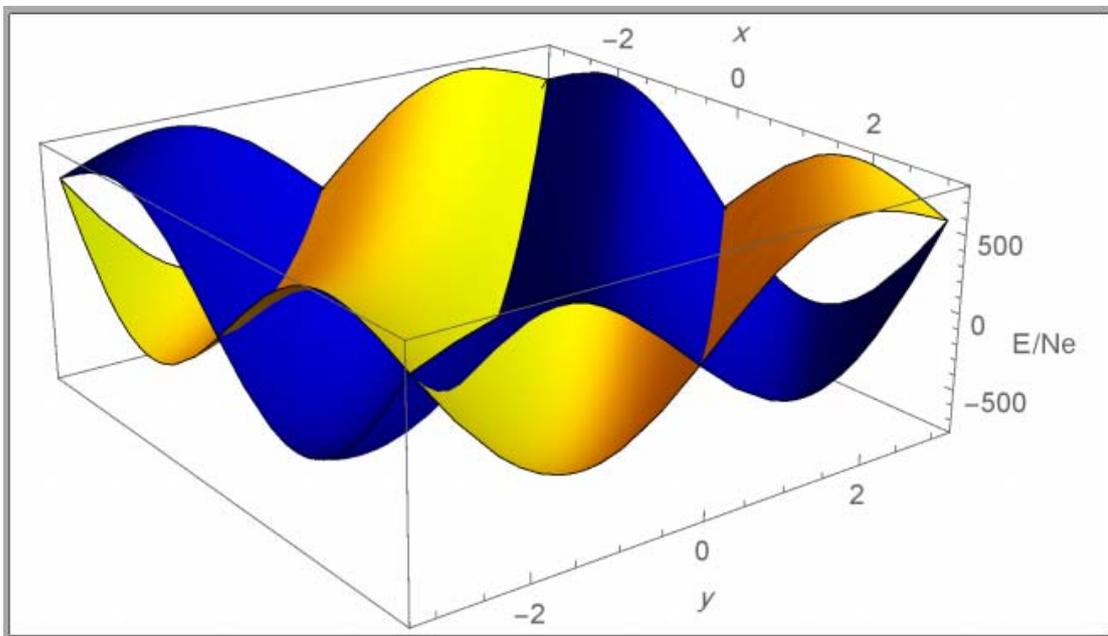
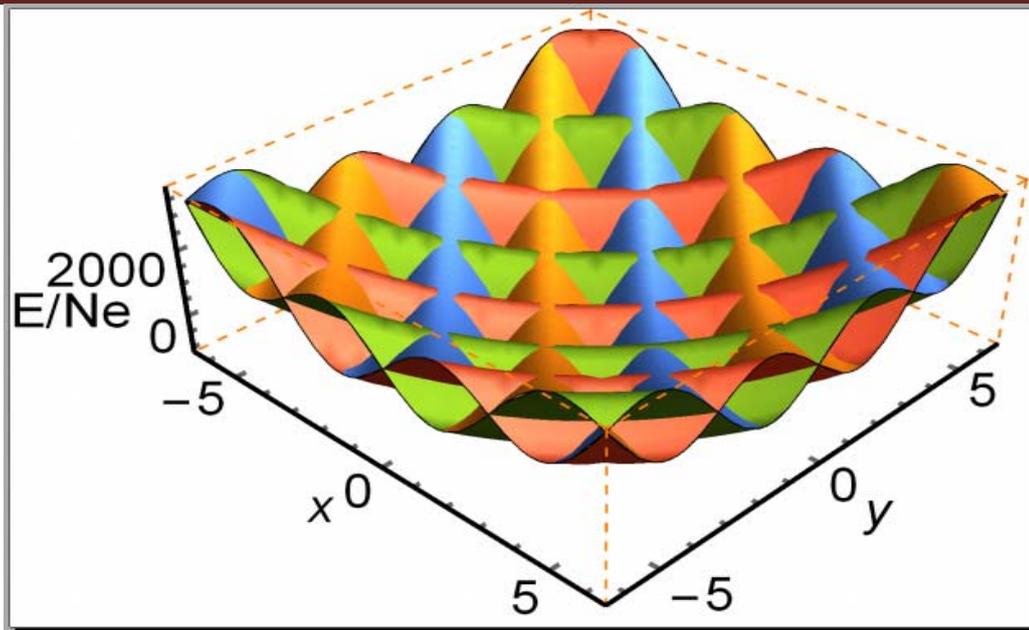
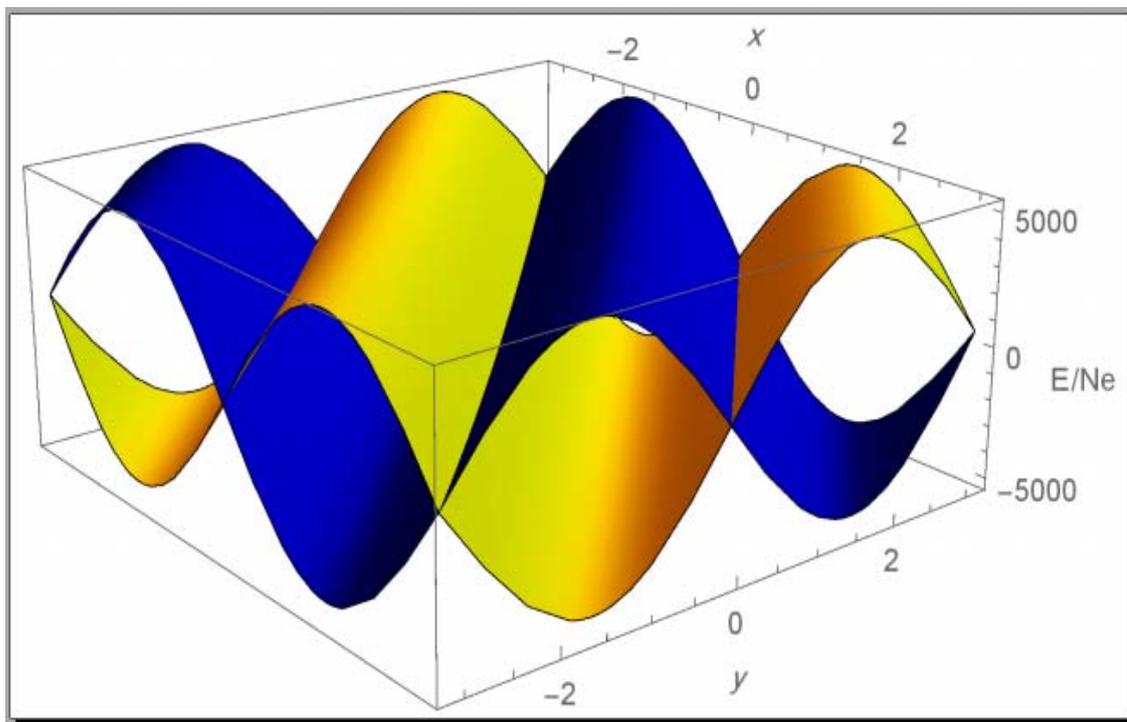


FIGURE.III.7 la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et modèle de stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500$.



FIGUE.III.8 la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et modèle de stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500$.

- Pour: $\alpha_y = 5000$



FIGUE.III.9 la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 5000$

- Pour: $\alpha_y = 500000$

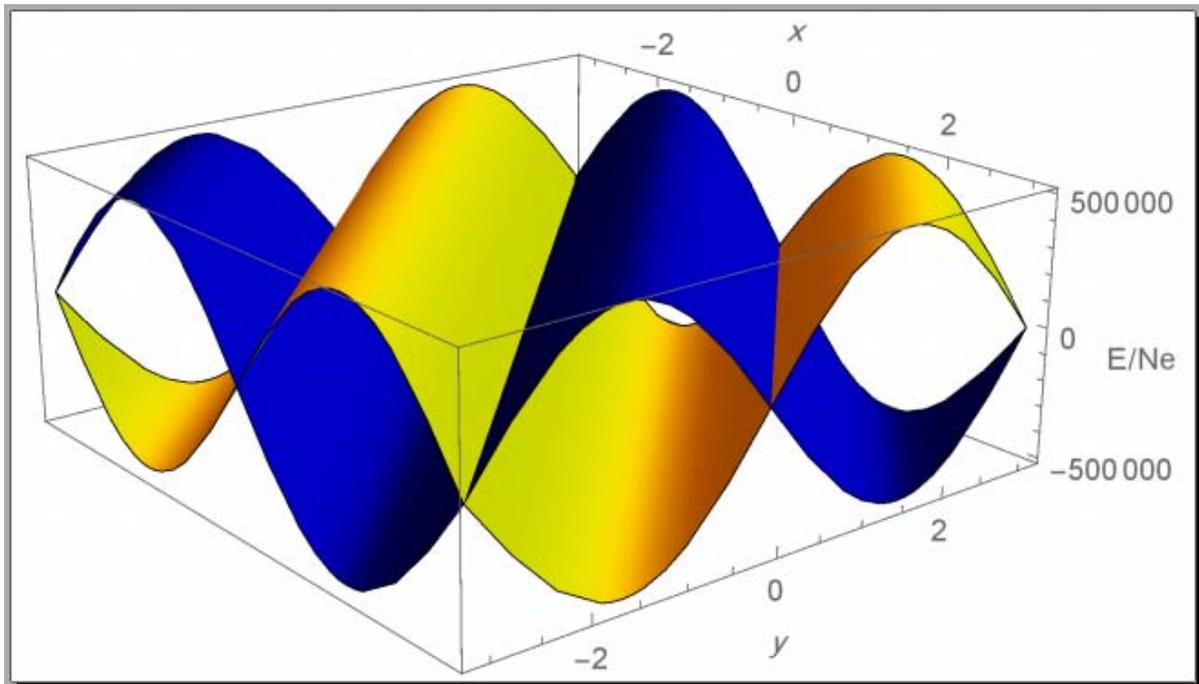


FIGURE.III.10: la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et model de Stoner pour valeur non nul positive de $\alpha_y = 500000$

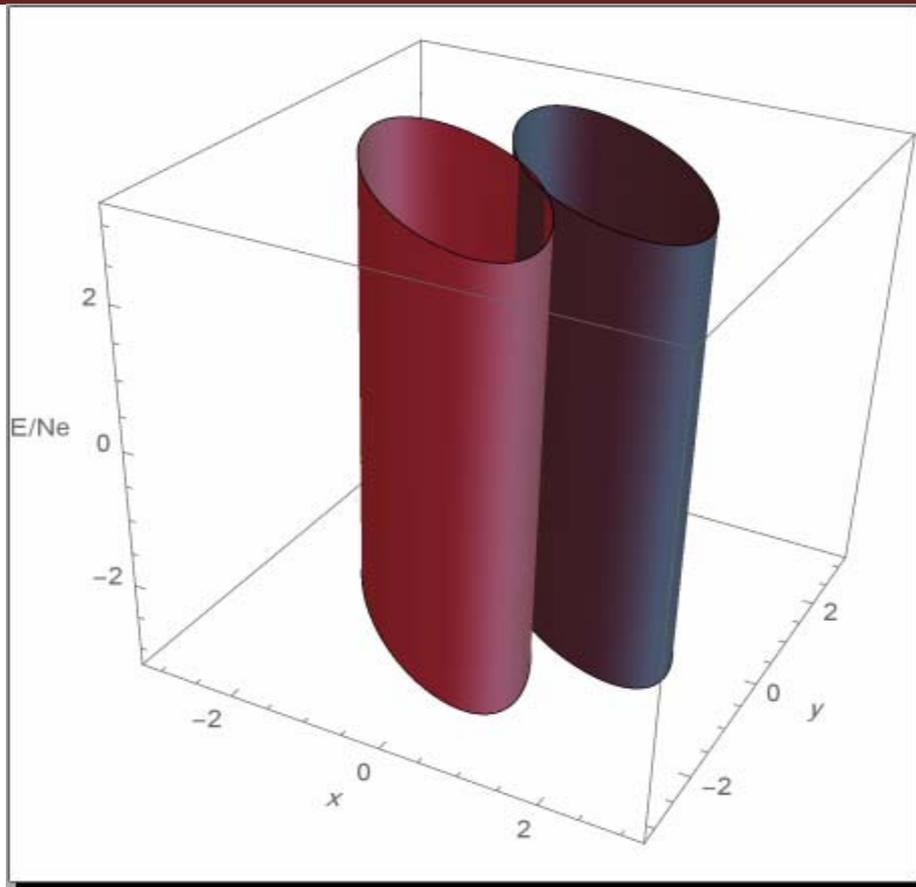


FIGURE.III.11: la figure qui présenter l'énergie périodique de système couplage de l'effet de Rashba et model de stoner pour $\alpha_y \neq 0$ (pour une forme cylindrique)

Quand augmenté la valeur de α_y le E_{gap} a été augmenté, on a une relation linéaire entre le deux, alors en peut contrôler la valeur de E_{gap} a partir de α_y

On a:

$$\alpha_y = \frac{4mc^2 E_y}{e}$$

Donc :

$$E_y = \frac{\alpha_y e}{4mc^2}$$

E_y : Le champ électrique appliqué selon y

Pour augmenté la valeur de α_y il faut augmenter l'intensité de champ appliqué, alors pour changée la valeur de E_{gap} nous changeons l'intensité de champ E_y .

Alors on a une possibilité de trouvé un système fonctionné comme un semi-conducteur ou un isolant, Cela est dû à l'intensité du champ appliqué.

Conclusion Générale

Conclusion générale

En 1984, Bychkov et Rashba ont introduit une forme simple de couplage spin-orbite pour expliquer certaines particularités de la résonance spin des semi-conducteurs bidimensionnels. Au cours des trente dernières années, des idées similaires ont mené à un grand nombre de prédictions, de découvertes et de concepts innovants bien au-delà Semi-conducteurs. [35]

Le modèle Stoner-Wohlfarth a été développé par Edmund Clifton Stoner et Erich Peter Wohlfarth et publié en 1948. Il comprenait un calcul numérique de la réponse intégrée d'aimants orientés aléatoirement. [3]

Dans cette mémoire, nous avons calculé l'hamiltonien du système couplage effet Rashba- modèle de Stoner, nous avons traversé une simulation par le Mathematica10 on trouvé des résultats prouvée que nous pouvons contrôler la nature physique du système (conducteur, semi-conducteur, isolant) grâce à notre contrôle de coefficient du Rashba a partir de l'intensité du champ électrique appliqué.

Nous notons une alternance entre la bande de conduction et la bande de valence, et cela est à cause de rotation de spin en raison de l'effet de Rashba et le modèle Stoner.

Aussi nous notons que nous pouvons contrôler la valeur de E_{gap} a l'utilisation de α_y et peut ainsi contrôler la nature physique du système de couplage (isolant, conducteur ou semi-conducteur) a partir la valeur de α_y .

Dans cette recherche, nous étions intéressés juste à le côté théorique, mais nous pensons que ce modèle théorique doit être inclus dans le côté expérimental pour découvrir de nouvelles applications.

Bibliographie

Références:

- [1] R. Winkler spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems Available on line at
- [2] G Bihlmayer, O Rader R Winkler (New; Phys 17(2015)050202
- [3] <https://wikipedia.org>
- [4] Elliott R J 1954 Spin-orbit coupling in band theory—character tables for some “double” space groups Phys. Rev. 96:280–7
- [5] Dresselhaus G, Kip A F and Kittel C 1954 Spin-orbit interaction and the effective masses of holes in germanium Phys. Rev. 95:568–9
- [6] Dresselhaus G, Kip A F and Kittel C 1955 Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals Phys. Rev. 98:368–84
- [7] Dresselhaus G 1955 Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures Phys. Rev. 100:580–6
- [8] R H Parmenter 1955 Symmetry properties of the energy bands of the zinc blende structure Phys. Rev. 100:573–9
- [9] Elliott R J. See Adams II E N 1953 Phys. Rev. 92:1063
- [10] Han Woong Yeom and Marco Grioni, eds, Special issue on electron spectroscopy for Rashba spin-orbit interaction, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, **201**, 1-126 (2015)
- [11] Lin, Y.-J.; K. Jiménez-García; I. B. Spielman (2011). "Spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates". *Nature*. **471**: 83–86
- [12] Florent BABOUX thèse de 3^{ème} cycle université de pierre et marie curie . paris VI (France) Soutenue le 27 septembre 2013
- [13] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, “Oscillatory Effects and the Magnetic Susceptibility of Carriers in Inversion Layers,” J. Phys. C: Solid State Phys., Vol. 17, No. 33 pp. 6039–6045, 1984.
- [14] Takaaki Koga Yoshiaki Sekine Vol. 10 No. 9 Sep. 2012
- [15] S. Faniel, T. Matsuura, S. Mineshige, Y. Sekine, and T. Koga, “Determination of Spin-Orbit Coefficients in Semiconductor Quantum Wells,” Phys. Rev. B, Vol. 83, No. 11, 115309, 2011.
- [16] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, “Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry,” Phys. Rev. Lett., Vol. 89, No. 4, 046801, 2002.

- [17] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, “Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy,” *P. Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 39, p. 66, 1984.
- [18] G. Bihlmayer, Y. M. Koroteev, P. M. Echenique, E. V. Chulkov, and S. Blügel, “The Rashba-effect at metallic surfaces,” *Surf. Sci.*, vol. 600, no. 18, pp. 3888–3891, Sep. 2006.
- [19] J. M. Luttinger, “Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory,” *Phys. Rev.*, vol. 102, no. 4, p. 1030, 1956.
- [20] Y. Ho Park, H. Kim, J. Chang, S. Hee Han, J. Eom, H.-J. Choi, and H. Cheol Koo, “Separation of Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions using crystal direction dependent transport measurements,” *Appl. Phys. Lett.*,
- [21] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, “Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted InGaAs/InAlAs Heterostructure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, pp. 1335–1338, 1997.
- [22] H. Nakamura, T. Koga, and T. Kimura, “Experimental Evidence of Cubic Rashba Effect in an Inversion-Symmetric Oxide,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 20, p. 206601, May 2012.
- [23] A. D. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio, N. Reyren, C. Cancellieri, and J.-M. Triscone, “Tunable Rashba Spin-Orbit Interaction at Oxide Interfaces,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, no. 12, p. 126803, Mar. 2010.
- [24] S. LaShell, B. McDougall, and E. Jensen, “Spin Splitting of an Au(111) Surface State Band Observed with Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 16, pp. 3419–3422, Oct. 1996.
- [25] C. Ast, J. Henk, A. Ernst, L. Moreschini, M. Falub, D. Pacilé, P. Bruno, K. Kern, and M. Grioni, “Giant Spin Splitting through Surface Alloying,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, no. 18, p. 186807, May 2007.
- [26] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, “Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface,” *Nat. Phys.*, vol. 5, no. 6, pp. 438–442, May 2009.
- [27] K. Ishizaka, M. S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura, “Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI,” *Nat Mater*, vol. 10, no. 7, pp. 521–526, Jul. 2011.
- [28] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, “Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy,” *P. Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 39, p. 66, 1984.

- [29] S. Datta and B. Das, "Electronic analog of the electro-optic modulator," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 56, no. 7, p. 665, 1990.
- [30] H. C. Koo, J. H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S. H. Han, and M. Johnson, "Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor.," *Science*, vol. 325, no. 5947, pp. 1515–8, Sep. 2009.
- [31] M. Dyakonov and V. Perel, "Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors," *Sov. Phys. Solid State*, vol. 13, no. 12, p. 3023, 1972.
- [32] V. M. Edelstein, "Spin Polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems," *Solid State Commun.*, vol. 73, no. 3, pp. 233–235, 1990
- [33] E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, "New photogalvanic effect in gyrotropic crystals," *JETP Lett.*, vol. 27, p. 604, 1978
- [34] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, "Berry phase effects on electronic properties," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, no. 3, pp. 1959–2007, Jul. 2010.
- [35] A. Manchon, H.C. Koo, J. Nitta, S.M. Frolov, R.A. Duine *New Perspectives for Rashba Spin-Orbit*
- [36] Jens Eiko Birkholz *Spin-orbit interaction in quantum dots and quantum wires of correlated electrons – A way to spintronics? Tag der mundlichen Prufung: 6.10.2008 page 23*
- [37] D. Bercioux and P. Lucignano, *Quantum transport in Rashba spin–orbit materials: a review*, *Rep. Prog. Phys.* **78**, 106001 (2015)
- [38] K.Ishizaka, K. Ishizaka, M. S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura, "Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI", *Nature materials* **10**, 521-526 (2011).
- [39] D. Di Sante, P. Barone, R. Bertacco, and S. Picozzi, *Electric Control of the Giant Rashba Effect in Bulk GeTe*, *Advanced Materials*, **25**, 509-513 (2013).
- [40] Mathias Getzlaff *Fundamentals of Magnetism page 42-48*
- [41] Jonathan Keeling *Quantum Magnetism the education of Henry Adams, twilight(1901) HENRY ADAMS page 37-38*
- [42] Carsten Timm *Theory of Magnetism November 4, 2015*
- [43] https://studies2.hec.fr/jahia/webdav/site/hec/shared/sites/mauffrey/acces_anonyme/Excel/Documents/simulation.pdf

[44] Dario Bercioux 2004 Spin-orbit interactions in semiconductor nanostructures Dario Bercioux

[45] Tomasz Dietl Institute of Physics, Polish Academy of Sciences September 2nd, 4th, 2009

Résumé

Nous visons ce travail à étudier l'influence de Rashba sur le modèle de Stoner en utilisant des calculs théoriques en présence des deux interactions. De plus, nous avons simulé l'énergie des quasi-particules. Nous avons donc atteint la possibilité de contrôler la nature physique de ce système en contrôlant le coefficient de Rashba, en modifiant l'intensité du champ électrique appliqué.

Mots-clés : Interaction de Rashba, stoner, spin orbite.

Abstrac

We aim through this work to study the influence of Rashba's on the model of Stoner by using theoretical calculations in the presence of the two interactions. Also, we have simulated the energy of the quasiparticles. So we have reached the possibility of controlling the physical nature of this system through controlling the Rashba's coefficient, which is by changing the intensity of the applied electric field.

Key words: Rashba interaction, stoner, spin orbit

ملخص

نحن نهدف من خلال هذا العمل لدراسة تأثير راشبا على نموذج ستونر باستخدام الحسابات النظرية في وجود التفاعلين. أيضا، لقد قمنا بمحاكاة طاقة شبه الجسيمات.. لذلك وصلنا إلى إمكانية السيطرة على الطبيعة الفيزيائية لهذا النظام من خلال السيطرة على معامل رشبا، والذي هو عن طريق تغيير شدة المجال الكهربائي المطبق

الكلمات المفتاحية : تفاعل رشبا ' ستونر ' انقلاب السبين