

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : **Physique des Rayonnements**

Par

Melle. Samadi Bochra

Sur le thème

*Etude du caractère demi-métallique ferromagnétique par
la méthode FP-LAPW des alliages ZnTe dopés en
vanadium*

Soutenu le .././2020 devant le jury composé de :

Mr. Zemouli Mostefa	Président	M.C.A	U . Saida
Mr. Boutaleb Miloud	Rapporteur	M.C.A	U . Saida
Mr. Boutaleb Habib	Examineur	M.C.A	U . Saida
Melle. Saadaoui Fatiha	Examineur	M.A.B	U . Saida

Année Universitaire 2019 - 2020

Dédicace

Je dédie la fleur de ce long chemin d'étude à toute personne qui a participé à ma formation et mon évolution durant toute la période à savoir.

A la source de patience, d'optimisme et d'espoir, et à tous ceux qui existent après Dieux et son messager à ma chère mère.

A la lumière de la lumière et du don divin à mon cher père.

Pour le poussin de la famille « KASSAM TIBYANNE » la perle de ma vie.

- *A mes chers frères*
- *A mes chères sœurs*
- *A mon proche ami*

A toute ma famille SAMADI et ALLALI.

A toutes les personnes chères à mon cœur et qui ont une place dans ma vie.

A tous les professeurs de l'université de Saïda et spécialement mon Encadreur Mr : Boutaleb Miloud pour toute orientation, assistance et efforts pour ma réussite.

A toute ma promotion du master Rayonnements 2019-2020.

S.Bochra

Remerciements

بسم الله الرحمن الرحيم

والصلاة والسلام على اشرف الخلق سيد المرسلين

قال الله تعالى « يرفع الله الذين امنوا منكم والذين اوتوا العلم درجات »

Ce travail de recherche a été réalisé au département de physique, à la faculté de Sciences de l'université Dr. TAHAR MOULAY SAÏDA.

Tous d'abord je tiens à remercier naturellement en premier lieu ALLAH le tout puissant qui m'a donnée la force, le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

J'exprime toute ma reconnaissance et mes remerciements particuliers à mon encadreur Docteur M. BOUTALEB, qui m'a permis de réaliser ce travail, pour son suivi permanent, ses conseils, ses lectures attentives. J'ai beaucoup apprécié son enthousiasme pour la recherche et la physique. Les échanges que j'ai pu avoir avec lui ont été très enrichissants. Il a assuré l'encadrement au quotidien du mémoire. Nos remerciements vont également à tous les membres de jury et à tous ceux qui ont participé de près.

A vous mes parent, je dis un immense merci. Je vous Suis infiniment reconnaissent pour votre soutien et vos encouragements. Je remercie également mes frères et sœurs, ainsi que Mes amis, ceux et celles-là que je porte dans mon cœur, Et qui m'ont toujours encouragée supporté moralement ; voilà j'en ai terminé mais si vous n'avez pas tout là, Tout peut se résumer en ces quelques mots : Merci à tous pour votre présence et votre soutien Indéfectible.

Enfin, je remercie tous mes collègues de département de physique et toute mes amies.

Mille Merci 

Table des matières

Table des matières	
Remerciement	
Dédicaces	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Liste des abréviations	
Introduction générale	
Bibliographies	

Chapitre I Généralités sur les semi-conducteurs

I.1- Introduction.....	5
I.2- Les différents types de des matériaux.....	5
I.2.1-Structure solide.....	5
I.2.2- Structure gaz.....	5
I.2.3- Structure liquide.....	5
I.3- Conducteur $\rho < 10^{-6} \Omega \text{ m}$	6
I.4- Isolant $\rho > 10^{10} \Omega \text{ m}$	6
I.5- Un semi-conducteur.....	6
I.6 - Bandes d'énergie.....	7
I.7- Les différents types des semi-conducteurs.....	8
I.7.1-Semi-conducteurs intrinsèques.....	8
I.7.2-Semi-conducteurs extrinsèques.....	9
I.7.2.a-Semi-conducteurs de type P.....	9
I.7.2.b-Semi-conducteurs de type N.....	11
I.8 - Les différents groupes des semi-conducteurs.....	11
I.8.1- Semi-conducteurs IV.....	12
I.8.2- Les semi-conducteurs II-VI.....	12
I.8.3- Définitions des semi-conducteurs III-V.....	12
I.9- Les différents types des composés semi-conducteurs.....	13
I.9.1- Les composés binaires.....	13
I.9.2- Les composés ternaires et quaternaires.....	14
I.10- Définitions des matériaux étudiés.....	16
I.10.1- Définition de tellure de zinc.....	16
I.10.2- Définition de vanadium.....	16
I.10.2.a- Caractéristiques notables de vanadium.....	16

I.10.2.b-Autres utilisations.....	16
I.11-Propriétés physiques des semi-conducteurs	17
I.11.1-Structure Zinc Blende.....	17
I.11.2-Structure Wurtzite.....	17
I.12-Le réseau réciproque et la première zone de Brillouin.....	18
I.13-Propriétés électroniques.....	18
I.13.1-Structure électronique du zinc (Zn).....	19
I.13.2-Structure électronique de tellure(Te).....	19
I.14-Propriétés structurales	19
I.14.1-Structure cristalline	19
I.14.2- Condition d'existence de la structure ZnS blende	20
I.14.3- Structure wurtzite.....	21
I.15-Gap direct et indirect.....	21
I.16.1-Spintronique.....	22
I.16.2-L'électronique de spin : électronique et magnétisme.....	22
I.17-Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS).....	23
I.17.1-Définition	23
I.17.2-Avantage des DMS à base de semi-conducteur.....	23
I.18-Conclusion	24
Bibliographie	

Chapitre II Théorie et méthodes de calcul

II.1- Introduction.....	27
II.2- La théorie de la Fonctionnelle de la Densité.....	27
II.3-L'approximation de Born-Oppenheimer	28
II.4-Approximation de Hartree (Approximation des électrons indépendants)	29
II.5-Approximation de Hartree-Fock.....	30
II.5.a-Déterminant de Slater	30
II.6-la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW)	32
II.6.1-La méthode des ondes planes augmentées (APW)	32
II.6.1.1-Historique de la méthode des Ondes Planes Augmentées (APW)	32
II.6.1.2-Principe de la méthode des Ondes Planes Augmentées(APW)	33
II.6.2-La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW)	36
II.6.2.1-Les avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW.....	37

II.6. 3-Le principe de la méthode FP-LAPW.....	38
II.7-Rôles des énergies de linéarisation (E_l).....	38
II.8-Le code WIEN2k	39
II.9-l'approximation du gradient généralisé(GGA).....	40
II.10-conclusion	41
Bibliographie	

Chapitre III Résultats de calcul et interprétations

III.1-Introduction.....	44
III.2-Propriétés structurelles	44
III.2.1-Description des structures.....	45
III.2.2-Paramètres d'équilibre.....	45
III.3-propriétés électroniques.....	47
III.3.1-Structure de bande.....	48
III.3.2--Densités d'états électroniques (D.O.S).....	50
III.4-Moment magnétique	52
III.5-Conclusion.....	52
Bibliographie	

Chapitre I Généralités sur les semi-conducteurs

Figure I.1 -Bandes d'énergie dans les différents types de matériaux.....	7
Figure I.2 -Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant.....	8
Figure I.3 -Semi-conducteur intrinsèque. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées).....	9
Figure I.4 -Les semi-conducteurs extrinsèques type P un bilan général du point de vu structure de bande, distribution des charges des deux types des semi-conducteurs est illustré à titre indicatif et à titre comparatif.....	10
Figure I.5 - Semi-conducteur type P. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique. c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées).....	10
Figure I.6 -Semi-conducteur dopé N. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'état énergétique c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées).....	10
Figure I.7 - Les semi-conducteurs extrinsèques type N.....	11
Figure I.8 -Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V.....	15
Figure I.9 -Structure Zinc-Blende (ZB).....	17
Figure I.10 -Structure Wurtzite.....	18
Figure I.11 -a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs (norme américaine).....	18
Figure I.12 - projection de la structure Zns.....	20
Figure I.13 -La structure des bandes d'énergie: gap direct et gap indirect.....	22

Chapitre II Théorie et méthodes de calcul

Figure II.1 -Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des Régions sphériques : sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β , respectivement.....	33
Figure II.2 : Le code Wien2k.....	40

Chapitre III Résultats de calcul et interprétations

Figure III.1 -Préparation de la Structure ternaire $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$	45
Figure III.2 -La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ dans l'approximation GGA-WC.....	47
Figure III.3 -Eclatement des orbitales 3d de V^{+3} dans la symétrie tétraédrique.....	47
Figure III.4 -Structure de bande électronique polarisée en spin de ZB $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ au paramètre de réseau d'équilibre.....	48
Figure III.5 -Structure de bande de $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC.....	50
Figure III.6 -La densité électronique de $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC.....	51

Chapitre I Généralités sur les semi-conducteurs

Tableau I.1- Extrait de la classification périodique des éléments.....13

Tableau I.2-Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V.....14

Chapitre III Résultats de calcul et interprétations

Tableau III.1-Constante d'équilibre de réseau calculée a_0 et module de masse B et ses dérivés de pression B' pour les alliages $Zn_{1-x}V_xTe$ 46

Tableaux III.2- Calcul du caractère half-métallique ferromagnétique du gap E_g et half-métallique du gap G_h des spins minoritaire pour $Zn_{1-x}V_xTe$ aux concentrations ($X=0.25$)...49

Tableaux III.3- calcul la bande de conduction (ΔE_c) et valence (ΔE_v); et les constantes d'échanges pour $Zn_{1-x}V_xTe$ à la concentration ($x=0.25$).....50

Tableau III.4-Moment magnétique totale et local (en magnéton de Bohr μ_B) pour $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ 52

Liste des abréviations

DMS	Dilutes magnetic semi conductor
CFC	Cubic Face-centered
GMR	Giant Magnetic résistance
TMR	Tunnel magnetic résistance
DFT	Density functional theory
FPLAPW	Full potential- local approximation plane wave
LAPW	Linéaire Augmented plane wave
APW	Augmented plane wave
GGA	Generalized Gradient Approximation
GGA+U	Approximation du gradient généralisée avec la correction de l'Hubbard
LDA	Local Density Approximation
DOS	Densités d'états
TDOS	Densités d'état total
PDOS	Densités d'état partielles
FM	Ferromagnétique
MT	Muffin-Tin
MRAM	Mémoires magnétiques à accès aléatoires
DRAM	Dynamic Random Access Memory
TC	Température curie
$\mu\beta$	magnéton de Bohr
HMF	demi-métallique ferromagnétique

A decorative graphic of a scroll with a light gray gradient and a green border. The scroll is unrolled in the middle, with the top and bottom edges curled up. The text is centered within the unrolled portion.

Introduction générale

La science des matériaux comporte un grand nombre de domaines très actifs de la recherche et technologie modernes. De ce fait leur rôle dans les futures industries ne cessera de prendre de plus en plus d'importance [1]. Puisque dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

La classe des matériaux semi-conducteurs II-VI font l'objet d'un grand intérêt et suscitent de nombreuses recherches ces dernières années, que ce soit à des fins technologiques, pour leurs éventuelles applications dans les domaines l'optoélectronique (les lasers, les lecteurs DVD, les télécommandes, les téléphones portables et autres dispositifs) et des télécommunications notamment, ou bien sur plan purement fondamental. Dans le présent travail, nous étudions les propriétés structurales électroniques et magnétiques des matériaux binaires à base ZnTe appartenant au groupe II-VI des semi-conducteurs ; ces composés peuvent se cristalliser dans la phase structurale cubique du type zinc blende avec le nombre de coordination (nombre de plus proches voisins) égal à 4.

Les semi-conducteurs dilués sont composés d'un réseau hôte semi-conducteur généralement de classes II-VI ou III-V dans lequel est réalisé un dopage avec des ions portant un moment magnétique tel que les métaux de transition (V, Mn, Cr, Co ...) [2]. L'étude sur les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) III-V et II-VI a été motivée par l'introduction d'une fraction de métal de transition ceci par substitution avec l'atome cationique dans la structure mère a des concentrations bien données pour ajuster les propriétés structurales et électroniques de ces types de matériaux, Ces derniers associent les propriétés des semi-conducteurs avec le spin de l'électron pour donner de nouvelles fonctionnalités. Cette élaboration donne au matériau des nouvelles propriétés magnétiques intéressantes, ces propriétés procurent nos matériaux à être des bons candidats pour le domaine de l'électronique de spin.

La spintronique, est l'abréviation de spin transfert électronique. Ce terme a été introduit en 1996 avec le nom de DARPA (Defense Advanced Research Projects Agency) pour développer à la fois une mémoire vive magnétique non volatile (MRAM) et des capteurs magnétiques pour des applications bien ciblées [3]. Cependant, ce domaine de la technologie a

réellement débuté huit ans plus tôt avec la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) à température ambiante par Albert Fert et ses collaborateurs [4] et de façon indépendante par Peter Grunberg et ses collaborateurs [5]. Cette découverte majeure a été reconnue en 2007 par l'attribution du prix Nobel de physique à ces deux scientifiques. Ces importantes découvertes technologiques et scientifiques ont été précédées par les expériences de Julliere [6] qui ont démontré l'effet magnéto-résistant dans une jonction tunnel magnétique (JMT) mais à des températures cryogéniques.

Les structures magnétorésistantes géantes MRG (GMR : Giant Magneto-Resistance) sont des matériaux formés de deux couches métalliques ferromagnétiques, séparées par une couche métallique non magnétique, tandis que les structures de magnétorésistance tunnel (TMR : Giant Magneto-Resistance) sont comme celles des MRG sauf qu'à la place de la couche métallique non magnétique on met une couche isolante ou semiconductrice.

Les propriétés physiques des solides tels que la structure électronique peuvent être déterminées par la fonctionnelle de la densité DFT [7] qui prend la densité électronique comme variable fondamentale et les propriétés physiques, notamment l'énergie totale du système d'électrons, peuvent être exprimés comme une fonction de celle-ci. Cette densité peut être obtenue par la résolution des équations de Kohn et Sham [8], pour un système d'équation de Schrödinger monoélectronique par des approximations dites LDA [9] ou GGA [10]. Avec plusieurs méthodes de calculs, parmi les méthodes ab-initio les plus connues et les plus utilisables, on cite la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) utilisée pour le calcul des propriétés physiques des matériaux.

Nous essayons d'étudier les propriétés structurales et électroniques et magnétique de Composé Zn Te à leurs étapes binaires et ses DMS(s) comme composés ternaires dopés par le vanadium (V) de la famille des semi-conducteurs II-VI dans la phase de zinc blende à la concentration $x=0.25$. Nous avons utilisé la méthode des ondes plan augmentée et linéarisée avec le potentiel complet (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en traitant l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation du gradient généralisée (GGA), implémentée dans le code Wien2k. Les calculs théoriques sont en mesure d'apporter un appui à l'expérience en confirmant des hypothèses ou en apportant une interprétation fondamentale à un phénomène concret.

Le travail que nous présentons dans ce manuscrit est organisé en trois chapitres initialisé par une introduction générale et clôturé par une conclusion générale :

Dans le premier chapitre est consacré à la présentation des généralités sur nos matériaux semi-conducteurs, leurs alliages, et leurs différentes propriétés.

Le deuxième chapitre concerne la description de la méthode de calcul ab-initio qui représente le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), ainsi que la méthode de FP-LAPW de première principe avec fonction d'approximation de GGA. Implémentée dans le code Wien2k.

Le troisième chapitre représente la partie résultats et interprétations de ce travail. Nous exposerons nos résultats correspondant aux propriétés structurales (Structure binaire, Structure ternaire), et les propriétés électroniques (densité d'états et structure de bande), et les propriétés magnétique du $Zn_{1-x}V_xTe$ a la concentration $X= 0.25$.

Enfin nous terminerons par une conclusion générale dans laquelle nous allons montrer quelques perspectives liées à nos résultats et les matériaux étudiés.

Bibliographie

- [1] : C. Pisani, R. Dovesi, C. Roetti, Hatree-Fock ab-initio treatment of crystalline systems, Springer Verlag, (1986).
- [2] : W. C. Jhonson, J. B. Parsons and M. C. Crew. J. Phys. Chem, 234 2651, (1932).
- [3] : S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. Von Molnar, M. L. Roukes, ... & D. M. Treger (2001). Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. Science, 294(5546), 1488-1495.
- [4] : M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, ... & J. Chazelas (1988). Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices. Physical review letters, 61(21), 2472.
- [5] : G.Binasch, P.Grünberg, F.Saurenbach, & W. Zinn, (1989). Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. Physical review B, 39(7), 4828.
- [6] : M.Julliere (1975). Tunneling between ferromagnetic films. Physics letters A, 54(3), 225-226.
- [7] : D. N. Nikogosyan. "Nonlinear Optical Crystals :A Complete Survey". Springer Science + Business Media.Inc
- [8] : W. Kohn and L. J. Sham. Phys.Rev 140 (4A) 1133 (1965).
- [9] : Francois Bottin, et Gilles Zerah, Parallelisation d'un code de calcul de Structure électronique. 26 janvier 2007.
- [10] : J.P.Perdew, K.Burke, and M.Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).

A decorative graphic of a scroll with a light gray gradient and a green border. The scroll is unrolled in the center, with the top and bottom edges curled up. The text is centered within the unrolled portion.

Chapitre I
***Généralités sur les
Semi-conducteurs***

I.1- Introduction

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

En électronique rapide et en optoélectronique [1,2], les composés semi-conducteurs sont préférables que d'autres (les propriétés du silicium par exemple sont insuffisantes : mobilités des porteurs relativement petites et transition électroniques indirectes au seuil d'absorption optique).

I.2 - Les différents types de des matériaux

Un matériau est généralement sélectionné en fonction des propriétés particulières qu'il doit notamment à sa nature chimique et/ou à sa forme physique. Ces propriétés permettront ensuite un usage spécifique de l'objet fabriqué. Les matériaux sont des substances naturelles, artificielles ou synthétiques, on peut distinguer plusieurs types de matériaux : solides, liquides ou gaz.

I.2.1- Structure solide

Un solide est un objet en trois dimensions, c'est-à-dire qu'il occupe un volume dans l'espace. Etat de la matière dans lequel les molécules sont fortement liées les unes aux autres, et caractérisés à l'échelle macroscopique par un volume et une forme déterminés constants en l'absence de toute forme extérieure. Les substances solides comportent des particules très compactes et très ordonnées, le degré de liberté dans ces substances est presque nul. [3]

I.2.2- Structure gaz

Les substances gaz comportent des particules non compact et non ordonnées, on peut dire que sont dispersées, leurs degré de liberté est plus élevé.

I.2.3- Structure liquide

Les substances liquides sont des particules peu-compactes et non n ordonnées, le degré de liberté est moyennement faible.

Les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes que sont isolant, les semi-conducteurs, conducteur (métal). On distingue ces types de matériaux en fonction de leur résistive ρ .

I.3- Conducteur $\rho < 10^{-6} \Omega \cdot m$

Un conducteur d'électricité est un corps capable de laisser passer un courant électrique. Souvent, un bon conducteur d'électricité est aussi un bon conducteur de chaleur. A l'opposé un isolant électrique est un corps qui ne laisse pas passer le courant électrique. Une partie des électrons possèdent une énergie suffisante pour se libère presque totalement des forces d'interaction avec le réseau. La présence des 4 électrons libre dans la couche périphérique (densité $n \approx 10^{22}$ à 10^{23} é/cm^3) est à l'origine de la conductivité électrique. Leur niveau d'énergie est situé dans la bande conduction.

I.4- Isolant $\rho > 10^{10} \Omega \cdot m$

En physique, le terme « isolant » renvoie historiquement d'abord à la propriété d'un corps qui ne transmet pas librement l'électricité. En électricité comme en électronique, un isolant, aussi appelé matériau diélectrique, est une partie d'un composant ayant pour fonction d'interdire le passage de tout courant électrique entre deux parties conductrices. Un isolant possède peu de charges libres, elles y sont piégées, contrairement à un matériau conducteur où les charges sont nombreuses et libres de se déplacer sous l'action d'un champ électromagnétique. Un isolant est souvent également un mauvais conducteur de la chaleur. Tous les électrons sont fortement liés aux atomes du cristal. L'énergie nécessaire pour les libérer est très élevée en particulier devant l'énergie thermique ou électrostatique qu'on peut fournir en élevant la température ou en appliquant un champ électrique. Leur mobilité est nulle.

I.5- Un semi-conducteur

Les semi-conducteurs ont acquis une importance considérable dans notre société. Ils sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques qui entrent dans les dispositifs informatiques, de télécommunications, de télévision, dans l'automobile et les appareils électroménagers, etc. On dit d'ailleurs que nous sommes à l'âge du silicium, le plus utilisé des semi-conducteurs.

Les semi-conducteurs sont des corps solides dont la conductivité électrique se situe entre celle des métaux et celle des isolants. La conductivité électrique des solides est une propriété qui est due à la présence d'électrons libres de se déplacer dans le milieu et de générer ainsi un courant électrique. Le courant électrique est un simple écoulement de ce fluide d'électrons libres. L'étude des corps purs et bien cristallisés montre que les cristaux se séparent en deux

grandes familles au voisinage du zéro absolu (-273°C) : les métaux conducteurs de l'électricité, qui contiennent un grand nombre d'électrons libres, et les isolants, où tous les électrons participent à des liaisons chimiques et sont donc fortement liés. Un semi-conducteur est un corps non cristallin non conducteur à l'état pur, mais susceptible de conduire de l'électricité suite à un traitement spécifique. Les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. La résistivité d'un métal peut être de l'ordre de $10^{-12}\Omega\text{ m}$ à 1K (kelvin) sans parler de la supraconductivité où la résistivité est rigoureusement isolant peut atteindre nulle. La résistivité d'un bon conducteur $10^{20}\Omega\text{ m}$. On a donc un rapport de 10^{32} entre un très bon conducteur et un très bon isolant. Ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant.

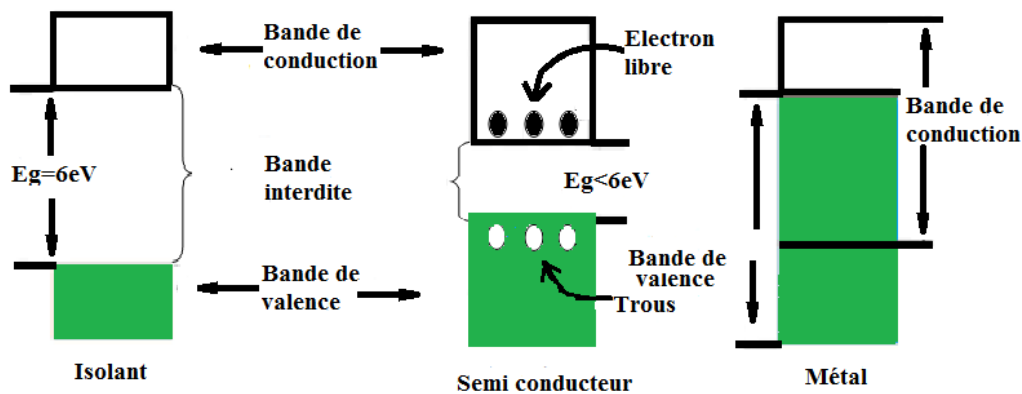


Figure I.1- Bandes d'énergie dans les différents types de matériaux [4]

I.6 - Bandes d'énergie

Considérons un atome de silicium Si isolé, les niveaux énergétiques de ses électrons sont discrets (voir le modèle de Bohr pour l'hydrogène). Lorsque l'on rapproche de ce dernier un atome identique, les niveaux énergétiques discrets de ses électrons se scindent en deux sous l'interaction réciproque des deux atomes.

Plus généralement, lorsque l'on approche N atomes, les niveaux énergétiques se scindent en N niveaux. Ces N niveaux sont très proches les uns des autres et si la valeur de N est grande, ce qui le cas pour un cristal, ils forment une bande d'énergie continue. La notion de rapprochement des atomes est donnée par la distance inter-atomique d .

A présent considérons des atomes de silicium Si arrangés aux nœuds d'un réseau périodique, mais avec une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être

considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par E_1 et E_2 . Rapprochons homothétiquement les atomes les uns des autres, les états énergétique électronique se scindent et forment deux bandes continues appelées bande de conduction BC et bande de valence BV. La figure I.2 montre la formation de ces bandes en fonction de la distance interatomique.

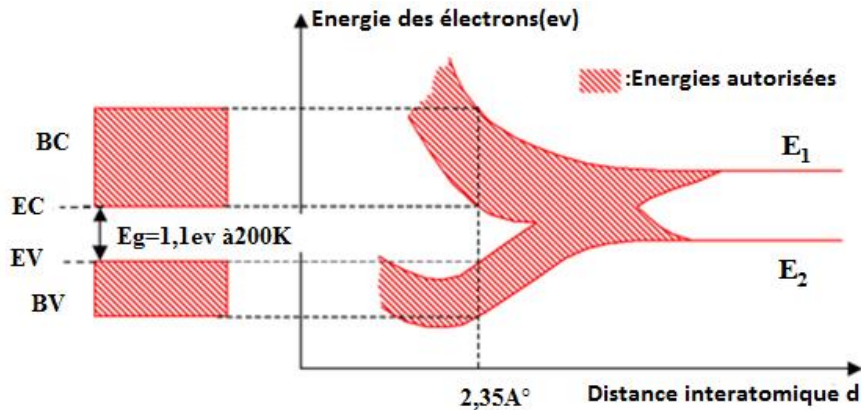


Figure I .2- Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant.

I.7-Les différents types des semi-conducteurs

I.7.1-Semi-conducteurs intrinsèques

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés présentant un réseau cristallin parfaitement périodique tout en ayant un taux d'impuretés très faible (moins de 1 atome d'impureté pour 10¹³ atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leur conductivité augmente avec la température, la figure ci-dessous donne un résumé global des semi-conducteurs intrinsèques du point de vu structure de bandes et distributions des charges. [5]

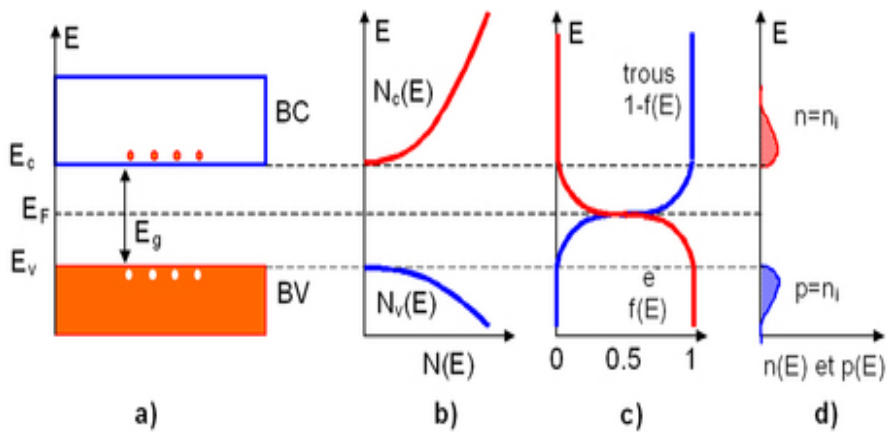


Figure I.3- Semi-conducteur intrinsèque. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées)

I.7.2- Semi-conducteurs extrinsèques

Un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque dopé par des impuretés spécifiques lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques (diodes, transistors, etc...) et optoélectroniques (émetteurs et récepteurs de lumière, etc...).

I.7.2.a-Semi-conducteurs de type P

Dans ce cas on introduit des atomes trivalents tels que gallium Ga, l'indium In, le bore B, l'aluminium Al. Il manque, alors, à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins. Un faible apport d'énergie (0.05eV) suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile. Les atomes trivalents (accepteurs) deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur. La conduction extrinsèque de type P (positive) augmente et est assurée par des trous, les trous deviennent majoritaires. la figure ci-dessous explique clairement le phénomène.

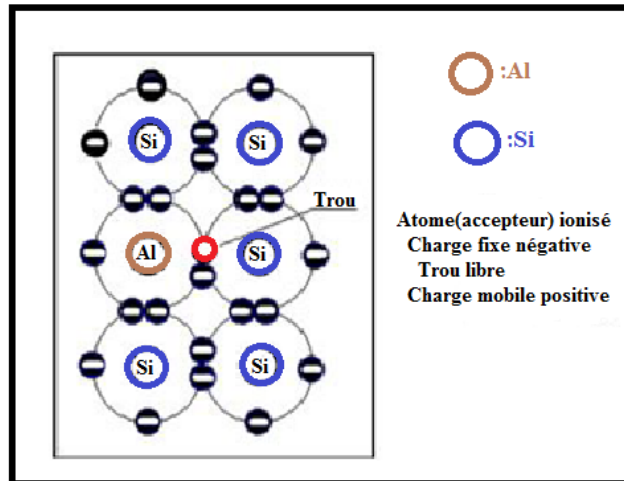


Figure I.4- Les semi-conducteurs extrinsèques type P un bilan général du point de vu structure de bande, distribution des charges des deux types des semi-conducteurs est illustré à titre indicatif et à titre comparatif.

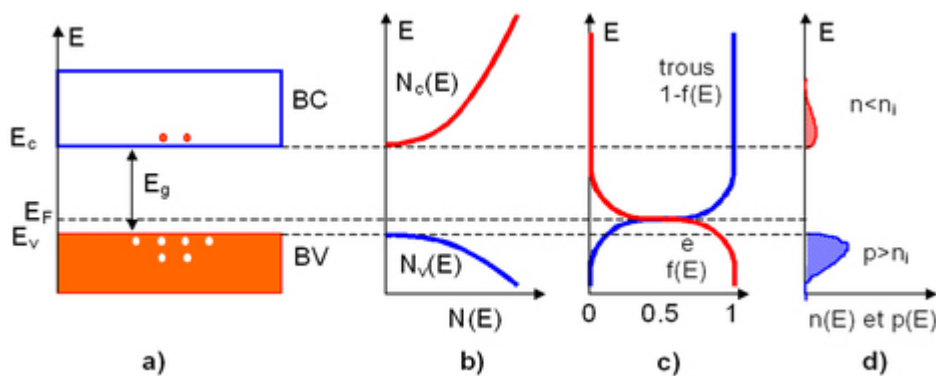


Figure I.5 - Semi-conducteur type P. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'états énergétique. c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées)

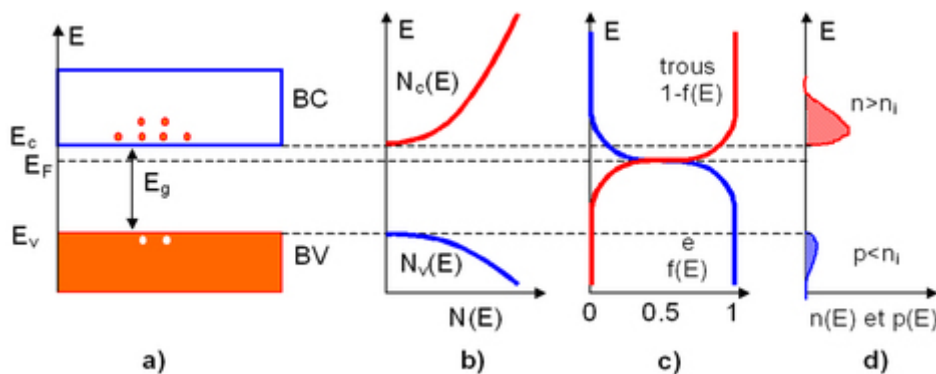


Figure I.6- Semi-conducteur dopé N. a) Diagramme des bandes d'énergie b) Densités d'état énergétique c) Distributions de Fermi-Dirac d) Densités énergétiques de porteurs (les densités de porteurs n et p correspondent aux surfaces hachurées)

Tous ces phénomènes de variation de conductivité trouvent leurs explications dans la théorie des bandes qu'on va expliciter ultérieurement.

I.7.2.b-Semi-conducteurs de type N

En introduisant des atomes pentavalents tels que le phosphore P, l'arsenic As (dopage N) dans un cristal, certaines liaisons se cassent laissant place à ces extra atomes qui ont cinq électrons de valence, ce qui comble les liaisons en laissant un électron libre dans le cristal peu lié au noyau ($E \approx 0.01\text{eV}$) et passe aisément dans la bande de conduction. Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction. [6]

Ceci qui augmente considérablement la conductivité du matériau dopé. Les charges négatives (électrons) sont dits majoritaires, comme on peut le voir dans la figure suivante.

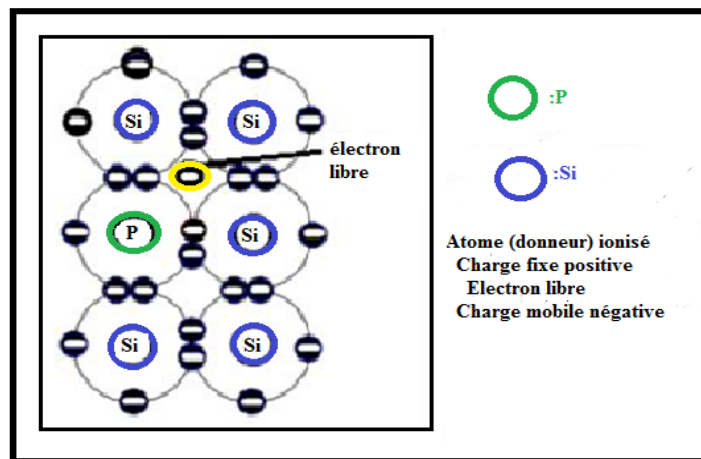


Figure I.7- Les semi-conducteurs extrinsèques type N

I.8- Les différents groupes des semi-conducteurs

La recherche sur les matériaux semi-conducteurs a commencée au début du 19ème siècle. Au fil des années de nombreux semi-conducteurs ont été étudiés. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium Si [7] et le germanium Ge [8 ,9] de la colonne IV du tableau périodique. Ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, mais d'autres, comme l'arséniure de gallium GaAs (III-V) [10] sont composés d'atome d'éléments différents : Ga (III) et As (V). La composition de semi-conducteurs permet d'accéder à des propriétés électriques et optiques que n'ont pas les semi-conducteurs purs.

Avant l'invention du transistor bipolaire en 1947 [11,12], les semi-conducteurs [13] sont présents dans seulement deux dispositifs électroniques que sont les photodiodes et les

redresseurs. Dans les années 1950, le germanium est le plus utilisé [14 ,15]. Cependant, il ne peut pas être employé dans les applications nécessitant une faible consommation de courant et/ou soumises à de hautes températures. Le silicium, d'un coût moins élevé et permettant des applications à faibles consommations, sera très utilisé dès 1960.

I.8.1- Semi-conducteurs IV

Il est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple ; silicium (Si) et de germanium (Ge). C'est un semi-conducteur pur sans défaut de structure. C'est un matériau semi-conducteur dont le comportement électrique ne dépend que de sa structure, et non de l'adjonction d'impuretés comme dans le cas du dopage.

I.8.2- Les semi-conducteurs II-VI

Les semi-conducteurs II-VI sont des composés polarisés de la maille élémentaire est constitué de deux éléments, les éléments de la colonne II entant que cations et les d'autre de la colonne VI comme des anions en échangeant deux électrons, ils cristallisent dans la structure zinc-blende ou wurtzite. Ils ont un grand gap, ils présentent un grand l'intérêt pour la réalisation des dispositifs électroluminescents, grâce à la largeur de leur bande interdite, ils peuvent émettre de la lumière visible avec des rendements d'émission importants, car ils sont à gap direct.

I.8.3- Définitions des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Ces composés sont stable dans la structure zinc-blende, et parfois ce cristallisent dans la structure wurtzite. Les semi-conducteurs III-V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- ✓ ils sont robustes
- ✓ ils possèdent une conductivité thermique élevée
- ✓ leur point de fusion est élevé
- ✓ ils ont une bande interdite directe

Les composés III-V se forment entre les cations de groupe III dans un état de trois électrons perdus et entre les anions captions trois électrons soit un échange de trois électrons pour avoir la symétrie cubique d'une géométrie tétraédrique par une simple hybridation de SP^3 . Le tableau I.8 regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et base représentent

respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

Tableau I.1- Extrait de la classification périodique des éléments [16].

Colonne III	Colonne V
${}_{5}^{11}\text{B}$	${}_{7}^{14}\text{N}$
${}_{13}^{27}\text{Al}$	${}_{15}^{31}\text{P}$
${}_{31}^{70}\text{Ga}$	${}_{33}^{75}\text{As}$
${}_{49}^{115}\text{In}$	${}_{51}^{122}\text{Sb}$

I.9- Les différents types des composés semi-conducteurs

Les semi-conducteurs est constitué au moins deux type atome différent. Les semi-conducteurs en composé binaire, il existe aussi d'autre type de semi-conducteur composé de trois atomes différents (ternaires) et même de quatre atomes (quaternaires).

I.9.1- Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [17], qui demande de semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces [18]. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau I.2 résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Tableau I.2 -Paramètres caractéristiques pour les principaux composés III-V [19,20,21].

Composé	Nomenclature	Maille	Dir/indir	Gap(ev)	a(A°)
AlN	Nitride d'aluminium	Wurtzite	Dir	6.28	4.380
AlP	Phosphure d'aluminium	zinc-blende	Dir	2.45	5.463
AlAs	Arséniure d'aluminium	zinc-blende	Indir	2.16	5.661
AlSb	Antimoniure d'aluminium	zinc-blende	Indir	1.58	6.135
GaN	Nitride de gallium	Wurtzite	Dir	3.36	4.520
GaP	Phosphure de gallium	zinc-blende	Indir	2.26	5.449
GaAs	Arséniure de gallium	zinc-blende	Dir	1.42	5.653
GaSb	Antimoniure de gallium	zinc-blende	Dir	0.72	6.059
InN	Nitride d'indium	Wurtzite	Dir	1.2	3.548
InP	Phosphure d'indium	zinc-blende	Dir	1.35	5.868
InAs	Arséniure d'indium	zinc-blende	Dir	0.36	6.058
InSb	Antimoniure d'indium	zinc-blende	Dir	0.17	6.479
BP	Phosphure de bore	zinc-blende	Indir	2.1	4.548

I.9.2- Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, $A_xA(1-x)B$ Exemple : $GaxIn(1-x)P$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court $GaInP$

Quaternaires 1+3 : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit : $A_xA_yA(1-x-y)B$. Exemple $GaxInyAl(1-x-y)As$.

Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit : $A_xA(1-x)ByB(1-y)$. Exemple $GaxIn(1-x)PyAs(1-y)$.

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (Relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de Substitution [22]. Le diagramme de la figure 1.1

représente les variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a qui varie lui-même avec la composition. Les points du graphe figurent la position des composés binaires, et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin a , en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince sur un substrat binaire comme GaAs ou InP. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [23].

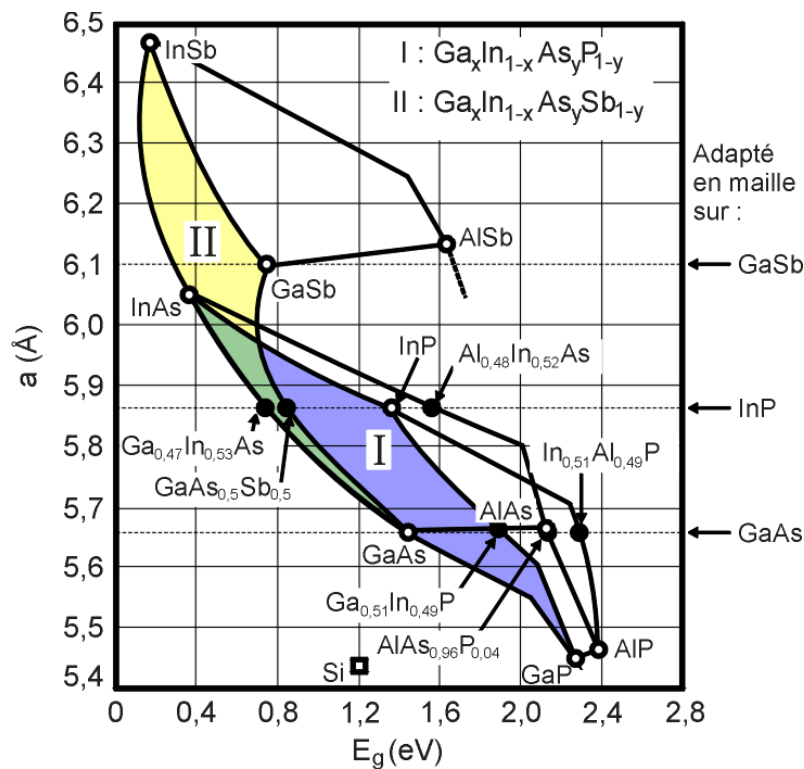


Figure I.8 - Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V. [23]

I.10- Définitions des matériaux étudiés

I.10.1- Définition de tellurure de zinc

Le tellurure de zinc est un composé chimique binaire de formule ZnTe. Ce solide est un matériau semi-conducteur II-VI, ayant un gap direct de 2,26 eV. C'est habituellement un semi-conducteur de type p. Comme la plupart des matériaux semi-conducteurs composites, il possède une structure de type « blende ».

I.10.2- Définition de vanadium

C'est l'élément chimique de numéro atomique 23, de symbole V. C'est un métal rare, dur et ductile que l'on trouve dans certains minerais. Il est principalement utilisé dans les alliages. Le vanadium possède 26 isotopes connus de nombre de masse variant entre 40 et 65, et cinq isomères nucléaires. Seul l'un de ces isotopes est stable, ^{51}V , et représente 99,75% du vanadium existant, les 0,25% restant étant constitués de ^{50}V , un radio-isotope naturel avec une demi-vie particulièrement longue de $1,5 \times 10^{17}$ années (soit 10 millions de fois l'âge de l'univers). De ce fait, le vanadium est un élément mono isotopique, mais pas un élément mono nucléidique. Sa masse atomique standard est de 50,9415 a.u, très proche de la masse isotopique de ^{51}V . Le vanadium dans la nature est formé de 2 isotopes : l'isotope ^{50}V à 0,24 %, très faiblement radioactif dû à sa demi-vie extrêmement longue de $1,5 \times 10^{17}$ ans ; et l'isotope ^{51}V à 99,76 %, stable. [24]

I.10.2.a- Caractéristiques notables de vanadium

Le vanadium est un métal blanc, brillant, dur et ductile, Il possède une bonne résistance à la corrosion par les composés alcalins, ainsi qu'aux acides chlorhydrique et sulfurique. Il s'oxyde rapidement à environ 660 °C. Le vanadium possède une bonne force structurelle ainsi qu'une faible section efficace d'interaction avec les neutrons de fission, ce qui le rend utile dans les applications nucléaires. C'est un métal qui présente à la fois des caractéristiques acide et basique. Environ 80 % du vanadium produit est utilisé dans le ferro-vanadium et comme additif dans l'acier.

I.10.2.b- Autres utilisations

Le pentoxyde de vanadium (V_2O_5) est utilisé dans les céramiques et comme catalyseur c'est aussi un des responsables de la corrosion chaude par des gaz (fluxage). Le vanadium est utilisé pour stocker l'énergie électrique dans des batteries à flux, encore peu répandues et en cours de développement⁵ (2007). Le vanadium est utilisé dans certains alliages d'acier

inoxydable comme pour l'acier chirurgical. Mélangé à l'aluminium et au titane on l'utilise dans la fabrication des moteurs de jet. [25]

I.11-Propriétés physiques des semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs sont exclusivement des solides cristallins. Leurs propriétés électroniques, optiques, mécaniques et thermiques sont donc liées à la géométrie particulière qui représente l'arrangement des atomes au sein du matériau : le réseau cristallin.

Le paramètre de maille (a) :

Le paramètre de maille d'une telle structure dépend de la nature des éléments chimiques mis en jeu. Une maille cristalline est d'autant plus grande que le numéro atomique des éléments la constituant est grand et inversement.

I.11.1-Structure Zinc Blende

La plupart des matériaux semi-conducteurs binaire III-V et quelques matériaux II-VI ont une structure Zinc-Blende (ZB) (**Figure I.9**), Cette structure est constituée de deux sous réseaux cubique faces centrée (cfc).

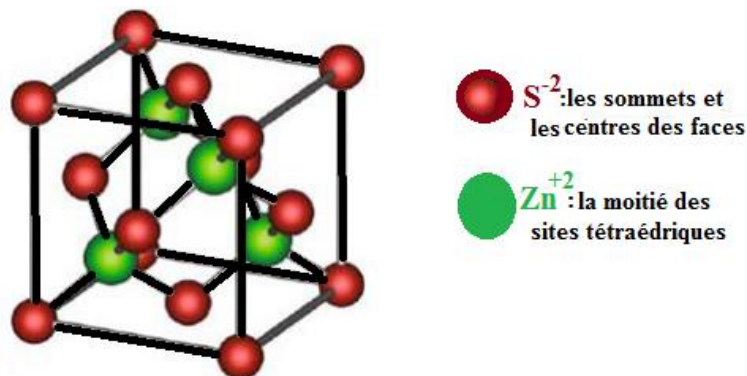


Figure I.9 - structure Zinc-Blende (ZB) [26].

I.11.2-Structure Wurtzite

La structure Wurtzite est un empilement hexagonal. Quelques composés binaires semi-conducteurs II-VI tels que le ZnS se cristallisent dans la maille Wurtzite (**Figure I.10**).

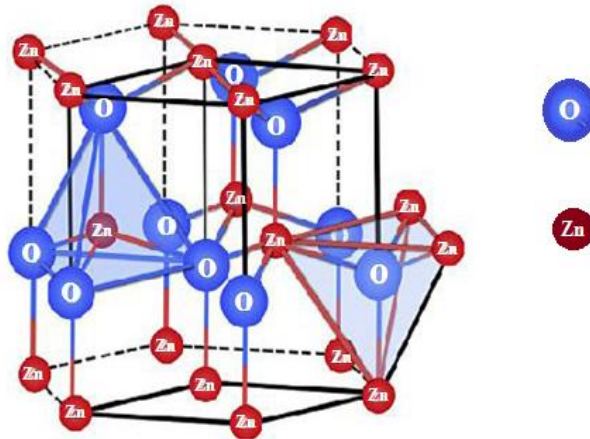


Figure I.10 - Structure Wurtzite.

I.12-Le réseau réciproque et la première zone de Brillouin

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées (énergie- vecteur d'onde) dans lequel on représente les variations des fréquences de vibration du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde k caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique) [26] Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin est représentée sur la figure I.11.

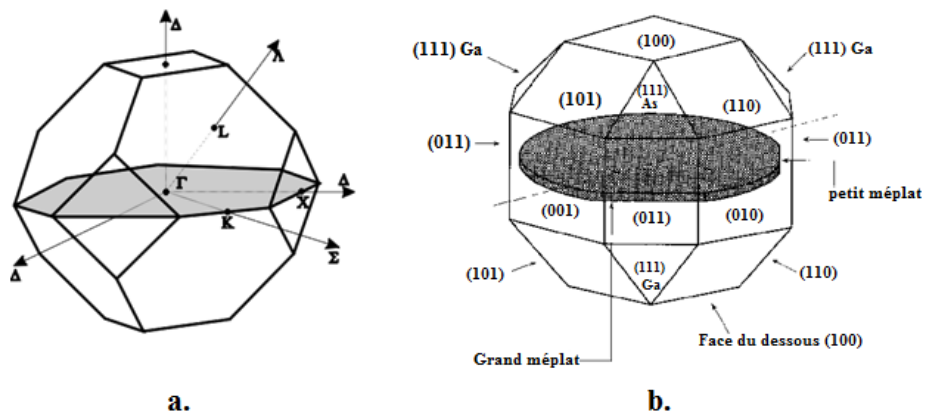


Figure I.11-a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs (norme américaine). [27]

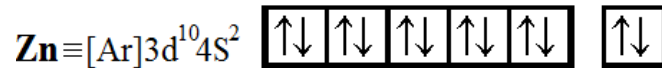
I.12 -Propriétés électroniques

La famille des matériaux semi-conducteurs, peut être divisée en deux groupes : les matériaux à gap direct, comme la plupart des composés issus des colonnes III et V du tableau

périodique des éléments chimiques, et les matériaux à gap indirect, comme le silicium (colonne IV).

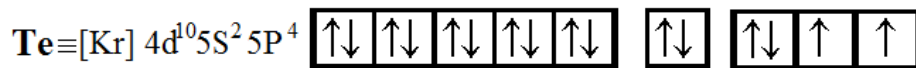
I.12.1-Structure électronique du zinc (Zn)

Dans l'atome du zinc (Zn) il y a 30 électrons, la configuration électronique du phosphore est donnée par la forme condensée suivante : $\text{Zn} \equiv [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2$ La distribution des électrons obéit au principe d'exclusion de Pauli et à la règle de Hund.



I.12.2-Structure électronique de tellure (Te)

L'atome de tellure possède 52 électrons, la configuration électronique de tellure est donnée par la forme condensée suivante : $\text{Te} \equiv [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^4$ La distribution des électrons obéit au principe d'exclusion de Pauli et à la règle de Hund.



I.13-Propriétés structurales

I.13.1-Structure cristalline

Les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. [28]

a)-stœchiométrie de la maille

Dans cette maille, il y a 4 ions zinc (au cœur de la maille) occupant la moitié de l'ensemble des sites tétraédriques c.-à-d. : 4 sites.

Apportant chacun Une contribution de 1 à la maille : 4. 1 = 4 atomes de zinc. Il y a 8 ions sulfure (Ceux des sommets) qui contribuent pour 1/8 dans la maille et 6 ions sulfure (Ceux des faces) qui contribuent pour 1/2.

Soit : $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ atomes de soufre.

On retombe bien sur une stœchiométrie 1-1.

b)-indices de coordination

Chaque ion zinc est entouré de 4 ions soufre, et chaque anion de soufre est entouré par 4 cations de zinc. Il s'agit d'une coordination tétraédrique 4-4.

I.13.2- Condition d'existence de la structure ZnS blende

Le rayon minimum du R^- min correspond à la situation où les ions zinc et chlorure sont tangents. On calcule R^+ min sur le quart de la diagonale du cube :

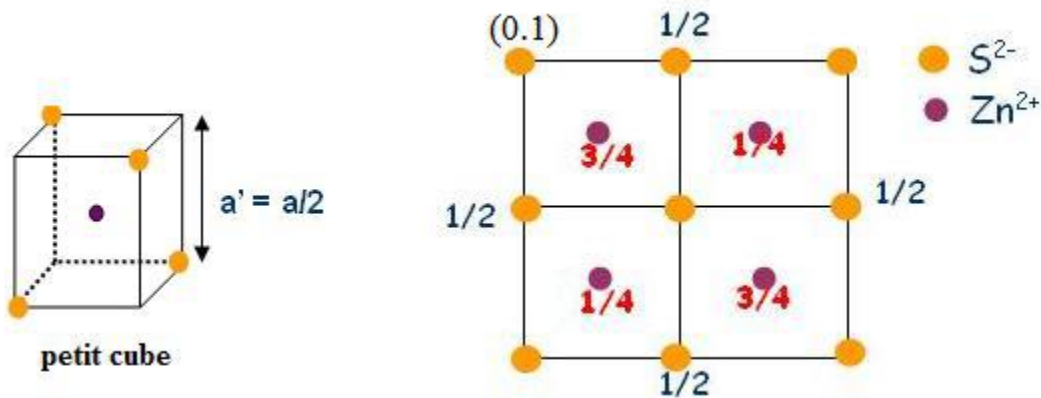


Figure I.12- projection de la structure ZnS

On en conclut qu'un solide ionique présente une maille cubique faces centrées de type ZnS blende est:

$$ZnS \text{ si } 0,225 < x < 0,414.$$

a)- Coordonnées réduites

Origine sur l'anion :

$$S^{2-} : (0 \ 0 \ 0) \ (1/2 \ 1/2 \ 0) \ (1/2 \ 0 \ 1/2) \ (0 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$Zn^{2+} : (3/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (1/4 \ 3/4 \ 1/4) \ (1/4 \ 1/4 \ 3/4) \ (3/4 \ 3/4 \ 3/4)$$

Si on fait une translation de type $(1/4 \ 1/4 \ 1/4)$ on obtient les nouvelles

Coordonnées :

Origine sur le cation:

$$S^{2-} : (1/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (3/4 \ 3/4 \ 1/4) \ (3/4 \ 1/4 \ 3/4) \ (1/4 \ 3/4 \ 3/4)$$

$$Zn^{2+} : (0 \ 1/2 \ 1/2) \ (1/2 \ 0 \ 1/2) \ (1/2 \ 1/2 \ 0) \ (0 \ 0 \ 0)$$

L'examen de ces nouvelles coordonnées montre que les ions Zn^{2+} forment Aussi un réseau CFC. La structure ZnS blende peut donc être décrite par Deux réseaux CFC, l'un constitué par les anions S^{2-} , l'autre par les Cations Zn^{2+} , décalés l'un de l'autre de $1/4$ selon la diagonale du Cube c.-à-d par une translation de type $(1/4 \ 1/4 \ 1/4)$.

b)-Positions

-un premier voisin : $V1=1/4 a +1/4 b +1/4 c$

-un deuxième voisin : $V2=1/2 a +1/2 b$

Les coordonnées respectives sont donc : $(1/4 \ 1/4 \ 1/4) \ (1/2 \ 1/2 \ 0)$.

I.13.3- Structure wurtzite

De nombreux composés binaires cristallisent dans la structure cristalline. Elle fait partie du système cristallin hexagonal. Le prototype chimique adopté par convention est le sulfure de zinc ZnS. Il s'agit de deux sous-réseaux hexagonaux compacts décalés de $R+ + R-$ selon l'axe c. Le sulfure de zinc existe principalement sous deux formes cristallines, ce dualisme étant souvent donné en exemple de polymorphisme.

a)-Coordonnées réduites

Origine sur l'anion : $(0 \ 0 \ 0) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/2) : (0 \ 0 \ 3/8) \ (2/3 \ 1/3 \ 7/8)$

Origine sur cation : $(0 \ 0 \ 5/8) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/8) : (0 \ 0 \ 0) \ (2/3 \ 1/3 \ 1/2)$

b)-Nombre de motifs

La maille élémentaire de ZnS wurtzite comprend 2 cations Zn^{+2} et 2 anions S^{-2} , le nombre groupements formulaires ZnS par maille est donc: $z=2$.

c)- Coordinece

La coordinece des deux ions est la même. L'indice de coordination est 4 pour Zn^{+2} et 4 pour S^{-2} : soit une coordination de 4-4

Les coordonnées respectives sont donc :

d)-Positions

-un premier voisin : $V1= 1/3 a +2/3 b$

-un deuxième voisin : $V2= a$

-un troisième voisin : $V3= (1+1/3)a +2/3b$

Les coordonnées respectives sont donc :

$(1/3 \ 2/3 \ 0) \ (1 \ 0 \ 0) \ (4/3 \ 2/3 \ 0)$. [3]

I.14-Gap direct et indirect

La bande interdite (le gap) est une caractéristique essentielle de chaque matériau, elles représentent les valeurs d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence dans une structure de bande, les structures représentées dans la (**figure I.13**) font apparaitre deux cas fondamentaux de semi-conducteur.

Les semi-conducteurs sont divisés en deux familles : les matériaux à « gap direct » ou « gap indirect ». Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont alignés sur la même vecteurs d'onde k ; alors la bande interdite est dite direct ou gap direct ; c'est le cas de nombreux matériaux. Au contraire, s'ils possèdent des vecteurs d'onde différents alors la bande interdite est indirecte ou gap indirect.

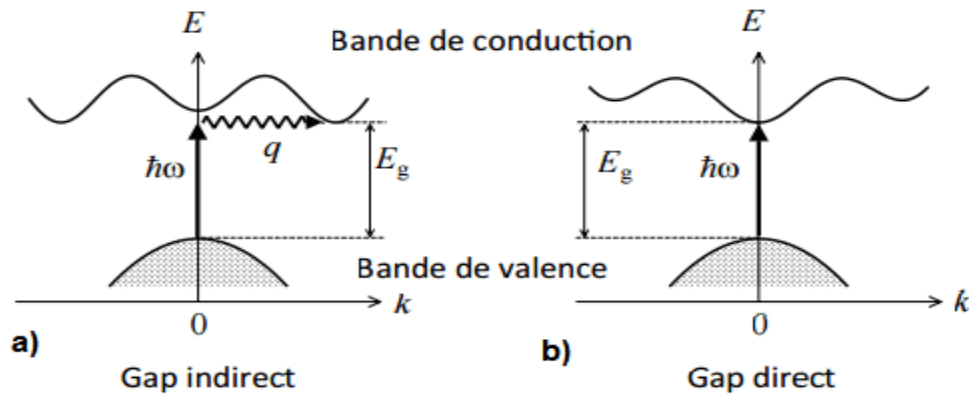


Figure I.13- : La structure des bandes d'énergie : gap direct et gap indirect [29].

I.15.1-Spintronique

La spintronique possède des applications importantes, les plus répandues étant la lecture des disques durs par la magnétorésistance géante (GMR), la magnétorésistance tunnel (TMR : Tunnel Magnétorésistance) et l'écriture des mémoires magnétiques (MRAM : Magnetoresistive Random Access Memories) dans nos ordinateurs.

I.15.2-L'électronique de spin : électronique et magnétisme

L'électronique de spin consiste à utiliser des charges électriques pour capter, transmettre et exploiter de l'information. Dans les semi-conducteurs, ces charges sont les électrons et les trous. Or ils portent, en plus de leur charge, un moment magnétique intrinsèque, le spin. Cette caractéristique n'est pas utilisée en électronique classique puisque les porteurs de charge ont un spin quelconque, ce qui donne une moyenne nulle sur les courants. L'électronique de spin (ou spintronique) se propose d'utiliser cette propriété supplémentaire afin de faire interagir le champ électrique, le champ magnétique, le courant et la polarisation, par exemple en contrôlant le courant non plus avec un champ électrique, mais avec un champ magnétique. Cela permet d'imaginer des dispositifs plus performants, que ce soit au niveau des fonctions, de la rapidité ou de la consommation.

Les recherches ont débuté dans ce domaine il y a à peine 20 ans, et pourtant ce n'est déjà plus simplement une curiosité de laboratoire. La spintronique est en effet à l'origine d'une

révolution dans le monde de l'informatique. En 1988, les équipes d'Albert Fert [30] et de Peter Grünberg [31] découvrent la magnétorésistance géante (GMR), que l'on peut considérer comme le point de départ du domaine (cela leur vaut le prix Nobel de physique 2007). À peine dix ans plus tard, IBM commercialise le premier disque dur utilisant cette technologie, permettant un formidable bond en avant en termes de capacité de stockage (multipliée par un facteur 1000 en trois ans).

I.16-Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)

I.16.1-Définition

Dans le domaine des semi-conducteurs, le dopage est l'action d'ajouter des impuretés magnétiques en petites quantités à une substance pure. Le dopage, c'est une technique qui vise à modifier l'énergie nécessaire pour rendre le semi-conducteur plus ou moins conducteur, c'est-à-dire il ajoute quelques propriétés physiques, électroniques chimiques, thermiques et surtout les propriétés magnétiques. Ces impuretés sont appelés accepteurs ou donneurs selon qu'ils produisent des trous ou des électrons respectivement.

I.16.2-Avantage des DMS à base de semi-conducteur

Dans cette partie nous avons donné quelques avantages des DMS à base S/C pour comprendre ; pourquoi ces matériaux sont très présents dans les recherches sur l'électronique de spin. Donc les principaux avantages de ces matériaux sont :

- grands temps de vie (jusqu'à 100 ns) des porteurs polarisés permettant leur transport sur plusieurs centaines de nanomètres ; forte efficacité dans la polarisation et l'injection de spins.
 - localisation des porteurs au sein d'hétéro structurent dans des puits quantiques ou des boîtes quantiques. Ajoutons à cela toutes les possibilités qu'ouvre l'ingénierie des bandes sur ces matériaux : ajustement du gap, du paramètre de maille et des contraintes, en fonction des besoins. Ces matériaux ont également quelques propriétés magnétiques intéressantes :
- ✓ l'existence, au-delà de la température ambiante d'une phase ferromagnétique.
 - ✓ l'importance de leur facteur de Lande, qui quantifie le couplage entre les propriétés de spin et le champ magnétique extérieur.
 - ✓ assure un splitting Zeeman conséquent. Les propriétés dépendantes du spin, telles que la rotation de Faraday géante sont ainsi amplifiées et un champ magnétique assez faible peut suffire pour polariser totalement les porteurs au niveau de Fermi [32].

I.17-Conclusion :

Dans ce chapitre on a présenté les propriétés physiques des matériaux ainsi que les structures cristallines, les bandes d'énergie. L'utilisation des matériaux composés apporté de nombreux avantages en termes des propriétés des matériaux. En effet, le but de leur fabrication est de profiter des bonnes propriétés de chaque matériau afin d'en former un qui sera mieux adapté à certaines application. la combinaison de deux matériaux ou plus, permet donc d'améliorer les propriétés d'un matériau, est cela a fait l'objet de plusieurs études et l'intérêt de plusieurs chercheurs. Par conséquent, à travers ce chapitre on peut conclure que :

- ❖ La plupart des matériaux cristallisent dans la structure sphalérite dite Zinc Blende.
- ❖ Les semi-conducteurs se présentent principalement sous deux phases cristallines : la structure Wurzite (Hexagonale) et la structure Zinc Blende (Cubique).
- ❖ Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde.

Bibliographie

- [1] : R.CASTAGNE,J.P. DUCHEMIN, M.GLOANNEC,CH.RUMELHARD,CircuitsIntègres en Arséniure de Gallium, Collection technique et scientifique des télécommunications, Masson (1989) .
- [2]:J.L. PANKOVE, Optical processes in semiconductors, Dover publications Inc. (1971)
- [3] : C.Kittel *Introduction à la physique de l'état solide*, Dunod (1972)
- [4]: G.MARTEL, documentation I.D.I.L, l'Université de Rouen, (2003).
- [5] Frederic P Miller, Agnes F Vandome, John McBrewster , " Semiconducteurs ", VDM Publishing House Ltd., 2010
- [6] Michel Sauzade, " Introduction à l'électronique analogique " , Paris sud, 1995
- [7] : J.J. Berzelius à Stockholm découvre Le silicium en 1824
- [8] : Le germanium est découvert par le savant allemand Clemens winkler en 1886.
- [9] : F. Tsui, He, L., Ma, L., Tkachuk, A., Chu, Y. S., Nakajima, K., And Chikyow, T Novel germanium-based magnetic semiconductors. Phys. Rev. Lett. 91, 17 (Oct 2003),177203.
- [10] : H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto and Y. Iye, Appl. Phys. Lett., 69, p. 363, (1996). "(Ga, Mn) As : "A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs
- [11] : J.Bardeen, W.Shockley et W. Brattain découvrent l'effet transistor
- [12] : "Milestones: Invention of the First Transistor at Bell Telephone Laboratories, Inc., 1947". IEEE Global History Network. IEEE. Retrieved December 7, 2014
- [13] : « for their researches on semiconductors and their discovery of the transistor effect» in Personnel de rédaction, « The Nobel Prize inPhysics1956 », Fondation Nobel, 2 010. Consulté le 16 juin 2010
- [14] : K.Gordon. Teal .and Little, John B. "Growth of Germanium Single Crystals," *Physical Review*, Vol. 78 (1950) p. 647
- [15] : K. Gordon. Teal. "Methods of Producing Semiconductive Bodies," *U. S. Patent 2, 727,840* (Filed June 15, 1950. Issued December 20, 1955)
- [16]: « IUPAC Periodic Table of the Elements » 28 novembre 2016 (consulté le26 décembre 2016).
- [17]: R. Castagné et all. Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception. Masson et CINET ENST Paris, (1989).
- [18]: S. Laval .Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique(2002).
- [19]: S. Adachi. Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors.Department of

Electronic Engineering. Gumma University, Japon, (2005).

[20]: C.Klingshirn .semiconductor optics.seconde edition .springer

[21]: f. h. Hassan. Contribution a l'étude des propriétés électronique et structurales des composés a base de Bore et de cuivre. These doctoral(2000)

[22]: B. Sabrina. Etude des états électroniques et posttonique de l'alliage AlInN dans la phase Zinc-Blinde (2002).

[23]: H.J. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors, Cambridge University Press, (1998).

[24]: D.R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press Inc, 2009, 90e éd., 2804 p., Relié (ISBN 978-1-420-09084-0)

[25] : B.Cordero, V.Gómez, Ana E. Platero-Prats, M.Revés, J.Echeverría, E.Cremades, F.Barragán et S.Alvarez, «Covalent radii revisited», D.Transactions, 2008, p. 2832 - 2838 (DOI10.1039/b801115j)

[26]: C. Kittel, « Physique de l'état solide », Ed Dunod, Paris,(1998)

[27]: Ph.Agnès, Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus (Thèse) : Institut national des sciences appliquées de Lyon, (1999).

[28]: Marius Grundman:Graduate texts in physics. The physique of Semiconductor. An Introduction Including Nanophysics .second edition.springer.

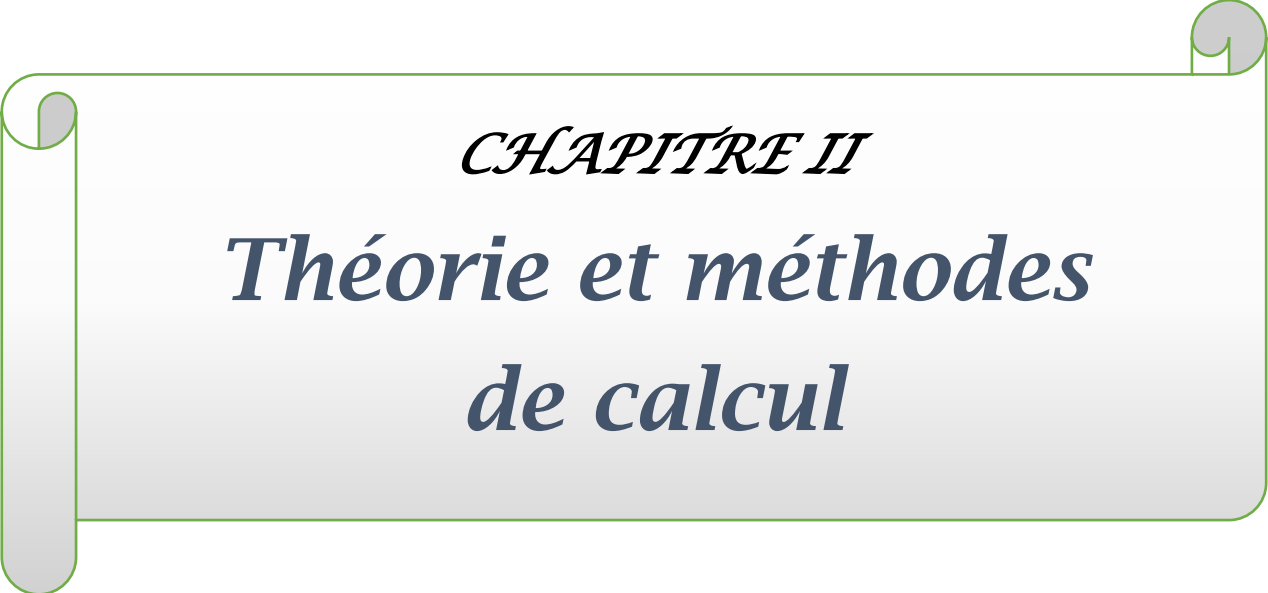
[29]: J.M.Frigerio Institut des NanoSciences de Paris. Ecole d'automne "MODELISATION" (2004).

[30] : BAIBICH, M. N., BROTO, J. M., FERT, A., VAN DAU, F. N., PETROFF, F., ETIENNE,P., CREUZET, G., FRIEDERICH, A., AND CHAZELAS, J. Giant magnetoresistance of

(001)fe/(001)cr magnetic superlattices. Phys. Rev. Lett. 61, 21 (Nov 1988), 2472–2475.

[31] :G.BINASCH,P.GRÜNBERG,F.SAURENBACH ,ANDW.ZINN,Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. Phys. Rev.B 39, 7 (Mar 1989), 4828–4830.

[32] :A. Haury, A. Wasiela, A. Arnoult, J. Cibert, T. Dietl, Y. M. D'aubigne and S. Tatarenko, Phys. Rev.Lett., 79, p. 511, (1997). "Observation of ferromagnetic transition induced by two dimensionnal hole gas in modulation.

A decorative graphic of a scroll with a light gray gradient and a green border. The scroll is unrolled in the center, with the top and bottom edges curled up. The text is centered within the unrolled portion.

CHAPITRE II
Théorie et méthodes
de calcul

II.1- Introduction

Il existe différentes méthodes de calculs de structures électroniques pour la résolution des équations de la DFT. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'onde prises comme base. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est l'une des méthodes les plus précises. Dans cette méthode aucune hypothèse de forme particulière n'est faite au niveau du potentiel. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW: linearized augmented plane wave), développée par Andersen [1], est fondamentalement une modification de la méthode des ondes planes augmentées (APW) développée par Slater, donc avant d'exposer le principe de LAPW, nous allons revoir les différents aspects de la méthode APW.

Dans ce chapitre, nous nous proposons de décrire la théorie sur laquelle repose le code WIEN2K utilisé tout au long de cette thèse. Nous donnerons tout d'abord les principes de base des calculs de premier principe puis nous présenterons les méthodes d'approximation utilisées : l'approximation du gradient généralisé GGA. Après, on présente la méthode des ondes planes augmentées linéarisées et les différentes améliorations de cette méthode.

Nous présenterons enfin une brève description du code WIEN2K.

II.2- La théorie de la Fonctionnelle de la Densité :

L'étude à l'échelle atomique des propriétés structurales, électroniques et optiques d'un cristal périodique est un des sujets traditionnels de la physique de l'état solide. Plusieurs modèles théoriques ont été proposés dans le but d'interpréter des mesures expérimentales et récemment, de prédire de nouveaux effets ainsi que de concevoir de nouveaux matériaux. D'un point de vue microscopique le problème peut être établi d'une manière simple. Ceci consiste à résoudre l'équation de Schrödinger décrivant un système cristallin périodique.

$$\hat{H}.\Psi = E.\Psi \quad (\text{II.1})$$

Ou :

E : est l'énergie totale du système.

Ψ : sa fonction d'onde (fonction propre).

\hat{H} : Son hamiltonien.

Dans le cas simple, l'Hamiltonien se compose de cinq termes : l'énergie cinétique des noyaux et celle des électrons, ainsi que les différentes interactions entre eux.

$$\hat{H} = \hat{T}_N(\mathbf{R}) + \hat{T}_e(\mathbf{r}) + \hat{V}_{NN}(\mathbf{R}) + \hat{V}_{Ne}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \hat{V}_{ee}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.2})$$

Avec :

$$\hat{T}_N(\mathbf{R}) = -\sum_k \frac{1}{2M_k} \nabla_k^2 \quad \text{Energie cinétique de noyaux.}$$

$$\hat{T}_e(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 \quad \text{Energie cinétique des électrons.}$$

$$\hat{V}_{NN}(\mathbf{R}) = \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k Z_l}{R_{kl}} \quad \text{Potentiel d'interaction noyau- noyau.}$$

$$\hat{V}_{Ne}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_i \sum_k \frac{Z_k}{d_{ik}} \quad \text{Potentiel d'interaction noyau-électron.}$$

$$\hat{V}_{ee}(\mathbf{r}) = \sum_j \sum_{i>j} \frac{1}{R_{ij}} \quad \text{Potentiel d'interaction électron - électron.}$$

L'équation (II.1), équation d'Erwin Schrödinger (1926) avec \hat{H} s'est révélée être extrêmement difficile à résoudre, même dans les cas les plus simples. Effectivement lorsque le nombre d'atomes augmente, les difficultés du calcul augmentent de façon exponentielle. Ainsi, lorsque l'on considère un certain nombre d'électrons N , leurs fonctions d'ondes dépendent de leurs N coordonnées tridimensionnelles. Par suite, la fonction globale dépend de $3N$ variables. Les diverses méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre d'approximations.

II.3-L'approximation de Born-Oppenheimer

Selon Born-Oppenheimer (Max Born (1882-1970) et Robert Oppenheimer (1904-1967), le traitement des électrons et des noyaux d'une façon séparée est la seule possibilité qui permet la simplification de ce problème et la résolution de l'équation de Schrödinger [2] Supposent que les noyaux sont très lourds et donc plus lents que les électrons, ainsi les électrons peuvent se déplacer dans le solide beaucoup plus rapidement que les noyaux. Donc, le mouvement de noyaux est négligeable alors leur énergie cinétique est nulle et l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux devient constante. Cette approximation est basée sur l'approximation adiabatique connue sous le nom « approximation adiabatique de BO » [3].

Le hamiltonien électronique peut ainsi être défini comme :

$$\vec{H} = \vec{V}_e + \vec{T}_{n-e} + \vec{V}_{e-e} \quad (\text{II.3})$$

Plusieurs méthodes existent pour la résolution de l'équation (II.2) dont les premières sont les méthodes de Hartree-Fock basées sur hypothèse des Électrons libres. Ces méthodes sont beaucoup utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules, mais elles sont moins précises pour les solides.

Il existe une méthode plus moderne et probablement plus puissante qui est la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Son histoire revient à la première trentaine du 20^{ème} siècle mais elle a été formellement établie en 1964 par les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn. Ces auteurs ont démontré que tous les aspects de la structure électronique d'un système dans un état fondamental non dégénéré sont complètement déterminés par sa densité électronique $\rho(r)$ au lieu de sa fonction d'onde.

II.4-Approximation de Hartree (Approximation des électrons indépendants)

Dans cette approximation [4], on considère que les électrons sont indépendants, sans corrélations et sans spin. Chaque électron se déplace dans le champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons du système et il est traité individuellement [5]. Ainsi, l'équation de Schrödinger à "n" électrons se ramène à "n" équations de Schrödinger à un seul électron :

$$H_{eff}\Psi(\vec{r}_i) = E\Psi(\vec{r}_i)\dots\dots\dots (III.6)$$

Tel que

$$H_{eff} = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}_i^2 + \hat{V}_{ext}(\vec{r}_i, \vec{R}_j) + \hat{V}_H(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\dots\dots\dots (III.7)$$

Où $V_{ext}(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$ représente l'interaction attractive entre l'électron de coordonnée \vec{r}_i et les noyaux de coordonnées \vec{R}_j .

$V_H(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$: est le potentiel d'Hartree issu de l'interaction coulombienne répulsive entre un électron de coordonnée \vec{r}_i , plongé dans le champ moyen des autres électrons de coordonnées \vec{r}_j

$$\hat{V}_H(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_j^n \int d\vec{r}_j \frac{|\Psi_j(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}\dots\dots\dots (III.8)$$

La fonction d'onde électronique employée avec ce Hamiltonien est constituée d'un produit mono-électronique, tel que :

$$\Psi(\vec{r}) = \prod_{i=1}^n \Psi_i(\vec{r}_i)\dots\dots\dots (III.9)$$

L'énergie totale E se compose de deux parties :

La première partie $E^{(1)}$ est due au mouvement d'une seule particule en interaction avec les noyaux du système :

$$E^{(1)} = \sum_{i=1}^n E_{ii}\dots\dots\dots (III.10)$$

$$E_{ii} = \int \Psi_i(\vec{r}_i) \left(-\frac{1}{2} \vec{\nabla}_i^2 + \hat{V}_{ext}(\vec{r}_i, \vec{R}_j) \right) \Psi_i(\vec{r}_i) d\vec{r}_i \dots \dots \dots (III.11)$$

La deuxième partie $E^{(2)}$ de l'énergie totale inclut la contribution de deux électrons i et j (c'est l'énergie de Hartree) :

$$E^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n J_{ij} \dots \dots \dots (III.12)$$

J_{ij} : est appelée l'intégrale de Coulomb.

$$J_{ij} = \iint \frac{|\Psi_i(\vec{r}_i)|^2 |\Psi_j(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d\vec{r}_i d\vec{r}_j \dots \dots \dots (III.13)$$

Pour résoudre ce système d'équations différentielles de Hartree, on procède par itérations successives. Par le biais des fonctions d'ondes individuelles $\Psi_1^{(1)}(\vec{r}), \Psi_2^{(1)}(\vec{r}) \dots \Psi_n^{(1)}(\vec{r})$. On calcule le potentiel effectif $V_H^{(1)}$. On réinjecte ce dernier dans le système que l'on résout, ce qui nous donne une autre série d'orbitales $\Psi_1^{(2)}(\vec{r}), \Psi_2^{(2)}(\vec{r}) \dots \Psi_n^{(2)}(\vec{r})$, ce qui nous donne un autre potentiel $V_H^{(2)}$, et ainsi de suite. On itère la procédure jusqu'à obtenir un potentiel $V_H^{(n)}$ qui est identique au potentiel de l'étape précédente $V_H^{(n-1)}$.

L'hamiltonien de départ n'est qu'une approximation de champ moyen et les électrons ne sont pas traités comme des fermions, c.à.d. ils sont considérés sans spin, par conséquent les solutions ne sont pas antisymétriques et ne vérifient pas le principe de Pauli, d'où l'approximation de Hartree-Fock.

II.5-Approximation de Hartree-Fock

II.5.a-Déterminant de Slater

C'est un déterminant introduit par Slater [6] pour remédier au problème de l'antisymétrie de la fonction d'onde (la fonction d'onde change de signe si on intervertit les électrons i et j) et donc satisfaire le principe d'exclusion de Pauli. La nouvelle interaction électron-électron résultant de l'anti-symétrisations est appelée interaction d'échange. Ce déterminant est appelé déterminant de Slater et s'écrit comme suit :

$$\Psi_{HF}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_n) \\ \Psi_2(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2) & & \Psi_2(\vec{r}_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \Psi_n(\vec{r}_1) & \Psi_n(\vec{r}_2) & & \Psi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix} \dots \dots \dots (III.14)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \det |\Psi_1(\vec{r}_1) \quad \Psi_2(\vec{r}_2) \quad \dots \quad \Psi_n(\vec{r}_n)| \dots \dots \dots (III.15)$$

Où $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ est un facteur de normalisation.

Fock[7] a employé le déterminant de Slater dans sa méthode, méthode de Hartree-Fock (HF), et qui stipule que pour chercher les fonctions d'ondes spin-orbitales nano électroniques $\Psi_i(\vec{r}_i)$, (orthonormées) minimisant l'énergie, on résout l'équation de Schrödinger en insérant $\Psi_{HF}(\vec{r})$ sous la forme du déterminant de Slater avec un Hamiltonien H comportant quatre termes d'énergie ; ainsi nous aurons :

$$\left(-\frac{1}{2}\vec{\nabla}_i^2 + \hat{V}_{ext}(\vec{r}) + \hat{V}_H(\vec{r}) + \hat{V}_X(\vec{r})\right) \Psi_{HF}(\vec{r}) = E \Psi_{HF}(\vec{r}) \dots\dots\dots (III.16)$$

Où $V_X(\vec{r})$ est le potentiel d'échange exprimé par :

$$\hat{V}_X(\vec{r}) = \sum_j^n \int \frac{\Psi_i(\vec{r}_i)\Psi_j(\vec{r}_j)\Psi_j(\vec{r}_i)\Psi_i(\vec{r}_j)}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|} d\vec{r}_j \dots\dots\dots (III.17)$$

Donc l'énergie totale donnée par la forme suivante [8]:

$$E_{HF} = \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle = \sum_{i=1}^n \epsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (J_{ij} - K_{ij}) \dots\dots\dots (III.18)$$

$$\epsilon_i = \Psi_i(\vec{r}) \left(-\frac{1}{2}\vec{\nabla}_i^2 + \hat{V}_{ext}(\vec{r})\right) \Psi_i(\vec{r}) d\vec{r} \dots\dots\dots (III.19)$$

Où K_{ij} est appelée l'intégrale d'échange, avec :

$$K_{ij} = \int \int \frac{\Psi_i(\vec{r}_i)\Psi_j(\vec{r}_j)\Psi_j(\vec{r}_i)\Psi_i(\vec{r}_j)}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|} d\vec{r}_i d\vec{r}_j \dots\dots\dots (III.20)$$

Les intégrales sont toutes réelles : $J_{ij} \geq K_{ij} \geq 0$.

Nous avons la propriété : $J_{ii} = K_{ii}$.

Dans la méthode de Hartree-Fock, chaque orbitale est soumise à un champ moyen électrostatique, et l'opérateur d'échange traduit la modification de l'énergie due au principe d'exclusion de Pauli.

Pour la résolution auto-cohérente de l'équation (III.16), on procède de la manière suivante :

1. Un ensemble de spin-orbitale d'essai, généralement construit sur des orbitales atomiques ou des ondes planes, est utilisé pour construire les potentiels $V_H(\vec{r})$ et $V_X(\vec{r})$.
2. La résolution de ces équations fournit des nouvelles fonctions mono-électroniques d'où les termes $V_H(\vec{r})$ et $V_X(\vec{r})$ sont réévalués.
3. On réitère ce processus jusqu'à ce que l'on obtienne des fonctions monoélectroniques et des valeurs propres qui n'évoluent pas.

4. Finalement, on calcule l'énergie totale et on ajuste la distribution du système de façon à minimiser cette énergie totale.

En examinant attentivement l'Hamiltonien de Hartree-Fock, on peut clairement constater que le potentiel due à la corrélation des électrons n'est pas pris en compte. Même pour des systèmes simples (atomes ou molécules simples), ce terme ne peut être négligé alors qu'en est-il pour les cristaux (un très grand nombre de particules). Par conséquent l'énergie calculée par Hartree Fock est surestimée et donc d'autres approches demeurent encore nécessaires.

II.6-la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW)

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : LinearizedAugmented Plane Wave), développée par Andersen [9], est Fondamentalement une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) élaborée par Slater [10 ,11].

Dans cette approche, l'espace de la matière est divisé en deux régions : unerégion sphérique proche du noyau des atomes dite sphère MT« muffin-tin » Et une région interstitielle (voir la figure (II .1)) Dans la méthode LAPW, on doit avoir la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT. Le potentiel atomique s'écrit sous la forme suivante :

$$V_{(r)} = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r)Y_{lm}(r) & \text{à l'intérieur de la sphère} \\ \sum_K V_K(r)e^{iKr} & \text{à l'extérieur de la sphère} \end{cases} \quad (\text{II.4})$$

Ce qui est l'origine du nom de la méthode FP-LAPW « full-potential LAPW». Ainsi, avant décrire la méthode FP-LAPW, et d'exposer leur principe, nous allons voir les différents aspects de la méthode APW, nous rappellerons les bases de cette dernière.

II.6.1-La méthode des ondes planes augmentées (APW)

II.6.1.1-Historique de la méthode des Ondes Planes Augmentées (APW)

À la recherche d'une base qui emploie des fonctions autres que les ondes Planes, Slater a stipulé que la solution de l'équation de Schrödinger pour un Potentiel constant est une onde plane, tandis que pour un potentiel sphérique c'est une fonction radiale. En 1937, Slater expose la méthode les ondes planes augmentées APW (en anglais :Augmented Plane Wave) dans son Article[12,13] dans laquelle, il a supposé qu'au voisinage du noyau Atomique le potentiel et les fonctions d'onde sont similaires à ceux que dans un atome isolé. Certainement, ils varient

fortement, mais ils sont presque sphériques, alors que les électrons qui sont loin du noyau considérés comme libres, d'où leur comportement est représenté par des ondes planes. La méthode APW est basée sur l'approximation « Muffin-tin » pour décrire le potentiel cristallin qui s'appelle le potentiel « Muffin-Tin ». [14]

II.6.1.2-Principe de la méthode des Ondes Planes Augmentées(APW)

Selon cette approximation, la cellule unitaire se divise en deux régions, illustrées sur la figure(II.1).

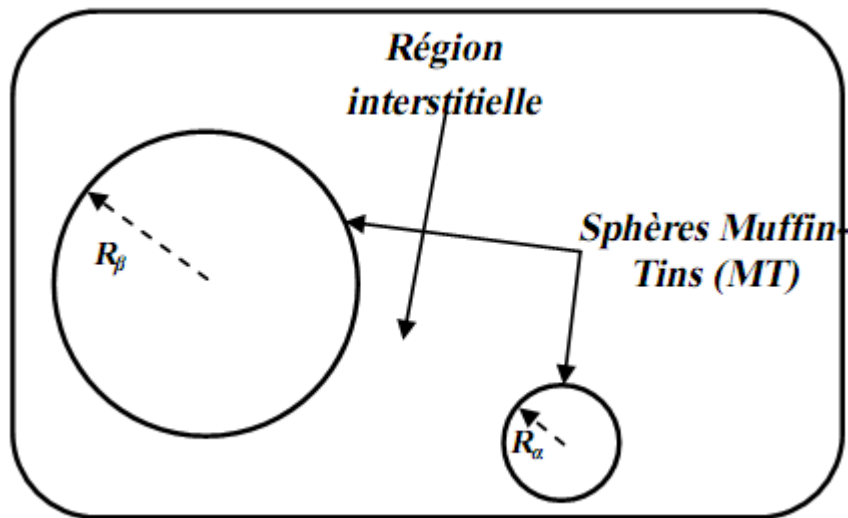


Figure II.1-Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des Régions sphériques : sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β , respectivement.

- La première région décrit les sphères appelées les sphères « Muffin-tin» [15] qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome α de rayon R_α (les sites atomiques) dans lesquels les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sont employées.
- La seconde décrit la région interstitielle délimitant l'espace résiduel Non occupé par les sphères (voir la figure II .1), où le potentiel est lisse ou varie très lentement.

Dans lesquelles deux catégories appropriées de bases sont utilisées :

- ✓ Des fonctions radiales multipliées par des harmoniques sphériques Dans les sphères atomiques « Muffin-tin » (région I).
- ✓ Des ondes planes pour la région interstitielle (région II).

Les deux régions sphérique et interstitielle sont définies par les fonctions d'ondes ϕ_I et ϕ_S qui sont écrites sous la forme suivante :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \phi_I = \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i(\vec{K}+\vec{G})\vec{r}} & . r > R_{\alpha} \\ \phi_S(\vec{r}) = \sum_{lm} A_{lm} U_l^{\alpha}(r, E_l) Y_{lm}(r) & . r < R_{\alpha} \end{cases} \quad (II.5)$$

$\Phi(\mathbf{r})$: La fonction d'onde.

Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.

$U_l^{\alpha}(\mathbf{r}, E_l)$: La fonction radiale.

$Y_{lm}(r)$: L'harmonique sphérique.

$C_{\mathbf{G}}, A_{lm}$: Les coefficients du développement en ondes planes et en harmonique sphérique.

\mathbf{K} : Le vecteur d'onde dans la première zone irréductible de Brillouin(ZIB).

\mathbf{G} : Le vecteur de réseau réciproque.

\mathbf{r} : Les positions à l'intérieur des sphères α et β .

$\mathbf{R}_{\alpha}; \mathbf{R}_{\beta}$: Les sphères Muffin tin α et β .

$U(r) V(r)$ est la solution radiale de l'équation de Schrödinger qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(R) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (II.6)$$

$V(r)$ est la composante sphérique du potentiel Muffin-Tin et E_l l'énergie de linéarisation.

Les fonctions radiales définies par l'équation (II.6) sont orthogonales à n'importe quel état propre du cœur. Cette orthogonalité disparaît à la frontière de sphère [16] comme le montre l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_2 - E_1) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 r U_1}{d r^2} - U_1 \frac{d^2 r U_2}{d r^2} \quad (II.7)$$

Où U_1 et U_2 sont des solutions radiales pour les énergies E_1 et E_2 . Le recouvrement construit en utilisant l'équation (II.7) et en l'intégrant par parties.

Slater justifie le choix particulier de ces fonctions en notant que :

- Les ondes planes sont des solutions de l'équation de Schrödinger Lorsque le potentiel est constant.
- Les fonctions radiales sont des solutions dans le cas d'un potentiel sphérique, Lorsque E_1 correspond à la valeur propre.

Cette approximation est très bonne pour les matériaux à structure cubiques à faces centrées, et de moins en moins satisfaisante avec la diminution de symétrie du matériau.

Pour assurer la continuité de la fonction $\psi(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} , doivent être développés en fonction des coefficients C_G des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi, après quelques calculs algébriques, nous Trouvons que :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G j_l(|K + G|R_\alpha) Y_{lm}^*(K + G) \quad (II.8)$$

Où j_l sont les fonctions sphérique de Bessel, provient de la surface des sphères Muffin-Tin. [9]. A partir de cette équation (II.7), les A_{lm} coefficients sont déterminées à partir de ceux des ondes planes C_G et E_l (les paramètres d'énergie). Les fonctions individuelles, étiquetées par G deviennent ainsi compatibles avec les fonctions radiales dans les sphères, et on obtient alors des ondes planes augmentées (APWs).

Les fonctions APWs sont des solutions de l'équation de Schrödinger dans les sphères, mais seulement pour l'énergie E_1 . En conséquence, l'énergie E_1 doit être égale à celle de la bande d'indice G . Ceci signifie que les bandes d'énergie (pour un point k) ne peuvent pas être obtenues par une simple diagonalisation, et qu'il est nécessaire de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La méthode APW ainsi construite représente quelques difficultés de calcul, dont celles liées au problème de l'asymptote, car les coefficients donnés par l'équation contiennent (II.7) le terme $U_l(R_\alpha)$ qui apparaît au dénominateur de l'équation. Il est donc possible de trouver des valeurs de l'énergie pour lesquels la valeur $U_l(R_\alpha)$ s'annule à la limite de la sphère. C'est ce qu'on appelle le problème de l'asymptote. Les calculs deviennent plus compliqués quand les bandes apparaissent près de l'asymptote.

Donc, afin de surmonter ce problème, plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par Koelling[14] et par Andersen [17]

II.6.2-La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW)

La méthode LAPW constitue l'une des bases les plus précises pour le calcul des solides cristallins, et comme nous avons déjà mentionné dans les paragraphes précédents que cette dernière utilise une description du potentiel de type Muffin-Tin et correspond à une amélioration de la méthode APW développée par Andersen [18, 19], Koelling et Arbman[18, 20] basé sur l'idée de Marcus.

Dans la méthode LAPW les fonctions de base dans MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(r)y_{lm}$ et de leurs dérivées $\dot{U}_l(r)y_{lm}$ par rapport à l'énergie. Les fonctions U_l comme dans la méthode APW (II.6) et la fonction $U_l(r)y_{lm}$ doivent satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = 0 \quad (II.9)$$

Les fonctions radiales $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$ assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes. Les fonctions d'onde ainsi augmentées constituent les fonctions de base de la méthode LAPW [21] :

Avec ce développement, la forme explicite des fonctions de base est :

$$\phi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i[(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}]} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_0) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_0)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (II.10)$$

Où E_l : est l'énergie de linéarisation, B_{lm} sont les coefficients qui correspondent à la fonction $\dot{U}_l(r)$ et de même nature que les coefficients A_{lm} . Ces derniers sont déterminés pour assurer la continuité du potentiel à la surface de la sphère « muffin tin ».

Dans la méthode LAPW, on utilise uniquement des ondes planes dans la zone interstitielle comme dans la méthode APW. Alors que à la région des sphères « Muffin-tin » les fonctions LAPW sont mieux adaptées que les fonctions APW.

Par conséquent, les fonctions radiales obéissent à l'équation de linéarisation suivante qui se base sur la série de Taylor [18] où la fonction $U_1(r)$ peut être développée en fonction de la dérivée $\dot{U}_1(r)$ et de l'énergie E_1 :

$$U_1(\mathbf{r}, E) = U_1(\mathbf{r}, E_1) + (E - E_1)\dot{U}_1(\mathbf{r}, E_1) + O((E - E_1)^2) \quad (\text{II.11})$$

Où

$$\dot{U}_1(\mathbf{r}, E_1) = \frac{\partial U_1(\mathbf{r})}{\partial E} \quad (\text{II.12})$$

Où $(E - E_1)^2$: représente l'erreur quadratique énergétique la méthode LAPW assure ainsi la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère MT. Mais, avec cette procédure, les calculs perdent en précision, par rapport à la méthode APW qui reproduit les fonctions d'onde très correctement, tandis que la méthode LAPW entraîne une erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre de $(E - E_1)^2$ et une autre sur les énergies de bande de l'ordre de $(E - E_1)^4$.

Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet, avec une seule valeur d' E_1 , d'obtenir toutes les bandes de valence dans une grande région d'énergie. Lorsque cela n'est pas possible, on peut généralement diviser la fenêtre énergétique en deux parties, ce qui est une grande simplification par rapport à la méthode APW.

En général, si $U_1(r)$ est égale à zéro à la surface de la sphère, sa dérivée $\dot{U}_1(r)$ sera différente de zéro.

II.6.2.1-Les avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW

On peut les résumer en quelques points :

- ❖ Dans la méthode LAPW, les énergies des bandes (au K-point donné) sont obtenues avec précision grâce à une seule diagonalisation. Alors que dans l'APW, il est nécessaire de calculer l'énergie pour chaque bande.
- ❖ Le problème d'asymptote (à la frontière de la sphère) ne se pose pas.
- ❖ dans LAPW c.-à-d. suite à l'introduction de la dérivée de la fonction radiale (la continuité) assure le non d'écoulement des ondes planes et les Orbitales locales.
- ❖ Les fonctions de base de LAPW ont une grande flexibilité à l'intérieur des sphères, ce qui présente une conséquence de la liberté vibrationnelle au contraire de l'APW où le paramètre d'énergie est fixé au lieu d'être variable.
- ❖ Dans la méthode LAPW, le temps de calcul est considérablement réduit et la convergence rapidement atteinte.

II.6. 3-Le principe de la méthode FP-LAPW

La méthode des ondes planes augmentées linéarités à potentiel total [17] combiné le choix de groupe de base LAPW avec le traitement complet de potentiel et la densité de charge.

Aucune approximation n'est faite pour la forme du potentiel ni de la densité de charge. Il n'existe pas d'approximation de forme dans la région interstitielle et à l'intérieur des Muffin Tins, i.e. le potentiel n'est pas contraint d'être sphérique dans les sphères et il est constant entre elles [18,23].

Le potentiel et la densité de charge sont plutôt développés en des harmoniques du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, et en des séries de Fourier dans les régions interstitielles. Ce qui est à l'origine du nom « Full-Potentiel ».

Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT qui se développe sous la forme suivante :

$$V_{(r)} = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \\ \sum_K V_K(r) e^{iKr} & r > R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.13})$$

De la même manière, la densité de charge est développée sous la forme suivante :

$$\rho_{(r)} = \begin{cases} \sum_{lm} \rho_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \\ \sum_K \rho_K(r) e^{iKr} & r > R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

FP-LAPW est une méthode qui présente un double avantage d'offrir une description complète du potentiel ainsi que des électrons. Elle sera une méthode de choix dès que les propriétés visées feront intervenir les électrons de cœur et dès que la précision sur l'énergie devra être extrême.

II.7-Rôles des énergies de linéarisation (E_l)

Les fonctions U_l et \dot{U}_l sont orthogonales à n'importe quel état de cœur strictement limité à la sphère MT. Mais cette condition n'est satisfaite que dans le cas où il n'y a pas d'états de cœur avec le même l , et par conséquent, on prend le risque de confondre les états semi-cœur avec les états de valence [24]. Ce problème n'est pas traité par la méthode APW, alors que la

non orthogonalité de quelques états de cœur dans la méthode FP-LAPW exige un choix délicat de E_1 . Dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_1 .

La solution idéale dans de tels cas est d'utiliser un développement en orbitales locales. Cependant, cette option n'est pas disponible dans tous les programmes, et dans ce cas, on doit choisir un rayon de la sphère le plus grand possible.

Finalement, il faut remarquer que les divers E_1 devraient être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbitales différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, E_1 doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande si la bande a le même l .

II.8-Le code WIEN2k

Le code WIEN2k est un programme de calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) basé sur la méthode FPLAPW. Il a été développé par P. Blaha, K.

Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz [25] (Vienna University of Technology, Austria). Le code WIEN2k est formé de plusieurs programmes indépendants (**figure(II.2)**) qui sont liés par C. Shell Script :

NN: C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère MT.

LSTART: Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bandes, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY: Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale .

KGEN: Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART: Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART. Alors un cycle auto-cohérent est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

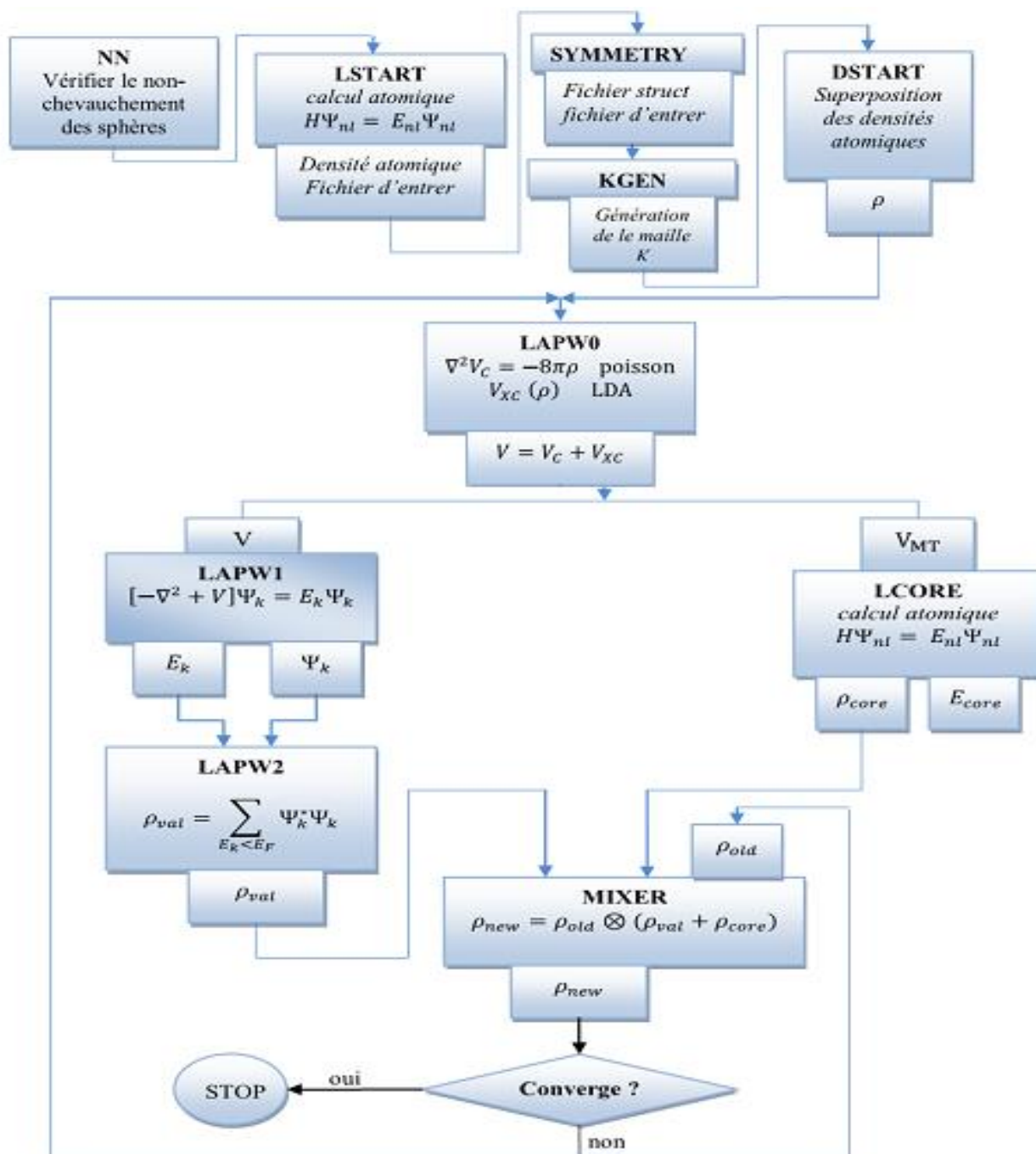
LAPW0: Génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1: Calcule les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2: Calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE: Calcule les états du cœur et les densités.

MIXER: Mélange les densités d'entrée et de sortie.



figureII.2 : Le code Wien2k[26].

II.9-l'approximation du gradient généralisé(GGA) :

L'approximation du gradient généralisé a été introduite pour améliorer la précision des résultats de la LDA. Elle consiste à écrire l'énergie d'échange et de corrélation non seulement en fonction de la densité électronique $\rho(r)$ mais aussi de son gradient de cette densité $|\nabla\rho(r)|$ pour prendre en compte le caractère non uniforme du gaz d'électrons[27].

Donc l'énergie ϵ_{xc} s'écrit comme suit :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int f[(\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r}))]d^3\mathbf{r} \quad (\text{II.15})$$

La GGA est donnée pour différentes paramétrisations parmi elles celle de Perdew et ses Collaborateurs.

II.10-conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la méthodologie qui nous servira tout au long de ce travail. Il s'agit d'une méthode de calcul de structure électronique axée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Sa mise en œuvre est faite à l'aide du code de calcul wien2k. Comme nous l'avons vu dans l'exposé de ce chapitre, cette méthode nécessite un certain nombre d'approximations pour la rendre pratique dans la majeure partie des simulations. On a les choisis comme notre base de travail dans toute la suite des calculs qui sera présenté dans le chapitre suivant.

Bibliographie

- [1]: O.K. Andersen, Phys. Rev B 12, 3060 (1975).
- [2]: W.Kohn, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 1253-1266.
- [3]: R. G. Parr, W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford university Press, Oxford, 1989.
- [4]: D.Hartree R. Proc. Camb. Phil. Soc 24 (1928) 89-110.
- [5]: M.Guymont, "Structure de la matière : Atomes, liaisons chimiques et cristallographie", (2003), ISBN : 978-2-7011-3631-8.
- [6]: T.Tsuneda, "Density Functional Theory in Quantum Chemistry", First Edition, (2014), ISBN: 978-4-431-54824-9.
- [7]: V.Fock, Z. Phys. 61 (1930) 126-148.
- [8]: G.Robert Parr, Yang Weitao, "Density-functional theory of atoms and molecules", (1989), ISBN: 0-19-504279-4.
- [9]: K. Endo, K. Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids 54, 15 (1993).
- [10]: A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 39, 1760 (1989).
- [11]: R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 34, 107 1 (1 986).
- [12]: J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
- [13]: R.M.Martin, "Electronic Structure" (Cambridge university press, 2004)
- [14]: Adrain P. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).
- [15]: J.S Slater Wave function in a perdioidic potential,phy.Rev.51:846-851.(1937).
- [16]: D.D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5,2041 (1975).
- [17]: O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [18]: S.Blugel et G.Bihlmayer, "Full-Potential Linearized Augmented Planewave Method" (John von Neumann Institute for Computing, 2006)
- [19]: O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [20]: D. D. Koelling et G. O. Arbman, "Use of Energy Derivative of the Radial Solution in an Augmented Plane Wave Method: Application to Copper", J. Phys. F (Metal Phys.) 5: 2041, 1975.
- [21]: J.M. Thijssen, Delft University of Technology, Computational Physics, Cambridge University press (1999).
- [22]: P. Hohenberg and W. Kohn, " Inhomogeneous electron gas ", Phys. Rev.B 136 : 864, 1964.
- [23]: D. R Hamann, Phys. Rev. Lett. 212, 662 (1979).

[24]: A. Canning, W. Mannstadt, A.J. Freeman, Computer Physics Communications 130, 233–243 (2000).

[25]: I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815.

[26]: P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, WIEN97. Technical University, Vienna, (1997).

[27]: R.G.PARR ET W.YANG. Density-Functional Theory of atoms and Molecules. OXFORDUNIVERSITYPRESS, (1989).

A decorative scroll graphic with a light gray gradient background and a green border. The scroll is unrolled in the center, with the top and bottom edges curled up. The text is centered within the unrolled portion.

CHAPITRE III
Résultats de calcul et
interprétations

III.1-Introduction

Au cours des dernières années, les matériaux semi-conducteurs ont été largement étudiés en tant que candidats potentiels pour de nouvelles applications de la spintronique [1, 2]. Les matériaux semi-conducteurs utilisés dans les dispositifs électroniques sont dopés dans des conditions précises pour contrôler la concentration et les régions de dopants.

Dans cette étude, nous avons effectué les calculs **DFT** des composés $Zn_{1-x}V_xTe$ à la concentration ($x = 0,25$) en utilisant la méthode FP-LAPW précise implémentée dans Code WIEN2k [3]. L'énergie de corrélation d'échange E_{xc} a été calculée en utilisant le schéma d'approximation du gradient généralisé proposé par Wu et Cohen (WC-GGA) [4] pour le calcul des propriétés structurales de l'état fondamental, tandis qu'une approximation du gradient généralisé [5] a été utilisée pour effectuer les calculs sur les propriétés électroniques et magnétiques. La raison du choix du WC-GGA fonctionnel pour les calculs de propriétés structurales est basé sur ses meilleures performances pour l'approximation des paramètres de réseau [6] par rapport à l'approximation de densité locale et d'autres schémas de paramétrisation GGA qui découlent du gradient du quatrième ordre extension de la fonction d'échange-corrélation.[7]

III.2-Propriétés structurales

L'équation empirique Birch-Murnaghan des états [8] est utilisée pour déterminer les paramètres du réseau d'équilibre en minimisant l'énergie totale en fonction du volume de l'alliages $Zn_{1-x}V_xTe$ ($x=0,25$)

$$E(V) = a + bV^{-2/3} + cV^{-4/3} + dV^{-6/3}$$

$$E(v) = \frac{BV}{B'} \left[\frac{(V_0/v)^{B'}}{B'-1} \right] + \text{cste} \quad (\text{III.1})$$

où V est le volume et a , b , c et d sont des paramètres d'ajustement. Les paramètres structuraux d'équilibre consistent en la constante de réseau (a_0), le module de volume (B_0) appelé module de compressibilité et sa première dérivée en pression (B') et l'énergie minimale (E_0).

III.2.1-Description des structures

Nous rappelons que le ZnTe est semi-conducteur de la famille II-VI cristallise dans une structure de zinc blende avec un groupe d'espace de $F43m$ (T_d), où les cations Zn^{+2} occupent un système cubique à faces centrées, il est situé à la position $(0,0,0)$ et les anions Te^{-2} situés à la moitié des sites tétraédriques de ce système cristallin, de sorte qu'il se situe à $(0,25, 0,25, 0,25)$ de la cellule cubique. On construit la super maille Zn_3VTe_4 de 8 atomes par substitution d'un cation de zinc par le vanadium (V^{+2}) à la position $(0,0,0)$. On obtient la super maille de $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ de maille élémentaire de 8 atomes avec la concentration $x=0.25$, et de nombre de coordination 4-4. (Voir Figure III.1)

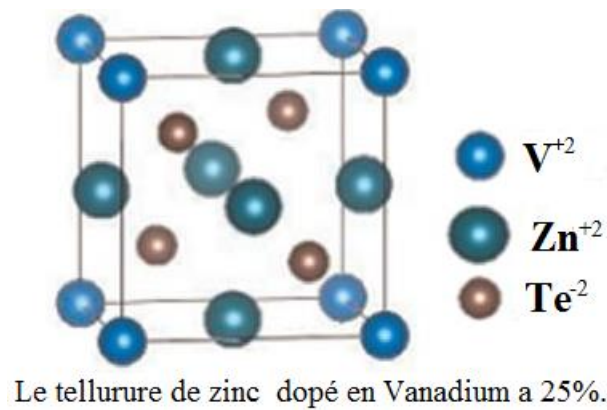


Figure III.1-Préparation de la structure ternaire $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$.

III.2.2-Paramètres d'équilibre

Nous avons calculé les paramètres d'équilibre des matériaux ZnTe et du composé ternaire $Zn_{1-x}V_xTe$ pour la concentration $x=0.25$, on utilisant l'approximation de gradient généralisé WC-GGA. La variation des énergies totales et des volumes d'équilibre a été ajustée avec l'équation d'état empirique de Murnaghan [9] pour obtenir les propriétés d'état fondamental telles que la constante de réseau d'équilibre (a), le module de volume (B) et la dérivée de pression de la zinc blende binaire et les super-maille de composés $Zn_{1-x}V_xTe$ à la concentration $x=0.25$ de Vanadium. Nos résultats et d'autres données théoriques sur ces matériaux [10, 11, 12,13] avec comparaison par les travaux expérimentaux [14-15] sont listés dans le tableau III.1.

Tableau III.1-Constante d'équilibre de réseau calculée a_0 et module de masse B et ses dérivés de pression B' pour les alliages $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$.

Composé	Concentration(x)	$a(A)^\circ$	$B(GPA)$	B'	Méthode
Ce travail					
ZnTe	0,00	6,2208	44,29	4,78	WC-GGA
$Zn_{1-x}V_xTe$	0,25	6,2103	46,00	4,74	WC-GGA
Autres calculs théorique					
ZnTe	0,00	6,029 (b)	55,90 (b)	5,10 (b)	
		6,183 (c)	43,70 (c)	6,01 (c)	
Calculs expérimentaux					
ZnTe	0,00	6,089 (a)	50,90 (a)	5,04 (a)	

(a) Ref. [16].

(b) Ref. [17].

(c) Ref. [18].

Les calculs ferromagnétiques WC-GGA d'énergie totale optimisée par rapport au volume cellulaire du $Zn_{1-x}V_xTe$ alliages ($x=0,25$) en phase B_3 sont représentés dans figure III.1. le tableau III.1 répertorie les valeurs de l'équilibre structural des paramètres tels que (a_0), (B_0) et (B'). On observe que pour le composé binaire ZnTe, les paramètres de réseau d'équilibre sont en bon accord avec les autres œuvres disponibles dans la littérature. Les écarts maximaux entre ces valeurs de là les constantes de réseau et les constantes expérimentales / théoriques sont de 2,16% pour ZnTe. Pour les alliages ternaires $Zn_{1-x}V_xTe$, rien de données expérimentales ou de calcul théorique ne sont disponibles. La figure III.2 montre l'évolution de la constante de réseau et de module de masse en fonction de la concentration de dopage V, où la constante de réseau diminue et le module de volume augmente avec concentration (x) qui prouve que le dopage V améliore la dureté du système cristallin. La courbe montre une identification parfaite de calcul avec l'application de l'équation de Murnaghan, ce qui explique que le calcul avec l'approximation WC-GGA est performant pour les paramètres structuraux.

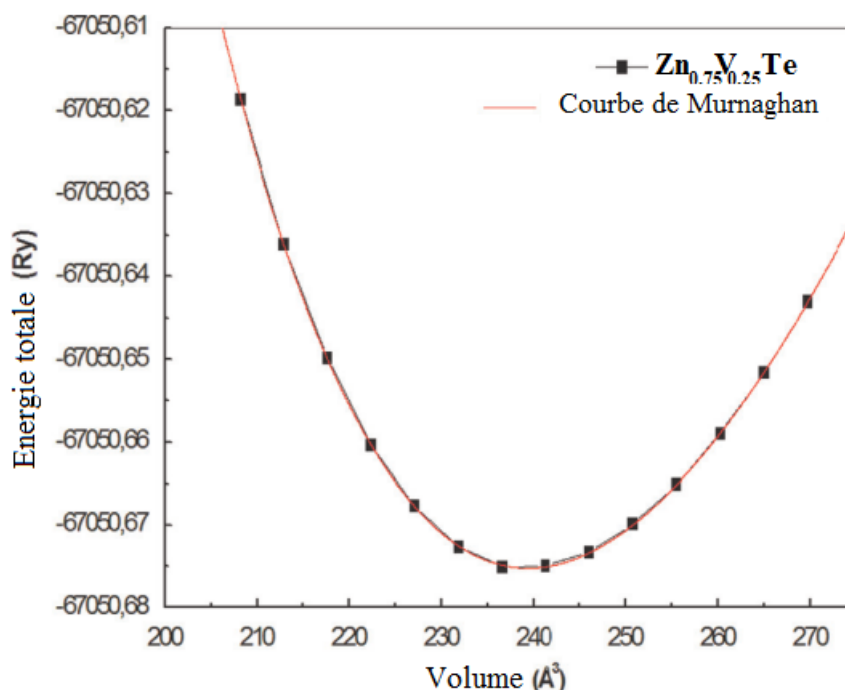


Figure III.2-La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour Zn_{0.75}V_{0.25}T dans l'approximation GGA-WC.

III.3-Propriétés électroniques

La distribution électronique du vanadium qui possédant 23 électrons on respectant la règle de Hund est apparue comme suit : ${}_{23}\text{V} \equiv {}_{18}[\text{Ar}] 4\text{S}^2 3\text{d}^3$, mais dans la liaison chimique Zn_{1-x}V_xTe quand l'atome de V est substitué par le site cationique de Zn, ils apparent comme $\text{V}^{+2} \equiv {}_{18}[\text{Ar}] 4\text{S}^0 3\text{d}^3$. Sous l'effet du champ cristallin tétraédrique [19-20] formé par l'encerclement des quatre ions (Te^{-2}), les orbitales 3d (V) subissent une levée de dégénérescence des niveaux électroniques, et répartissent en deux groupes séparés par l'énergie du champ cristallin tétraédrique; un triplé des états de haute énergie t_{2g} (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz}) et un doublet des états de basse énergie e_g (d_{z^2} ; et $d_{x^2-y^2}$) symétrique selon la (Figure III.3) :

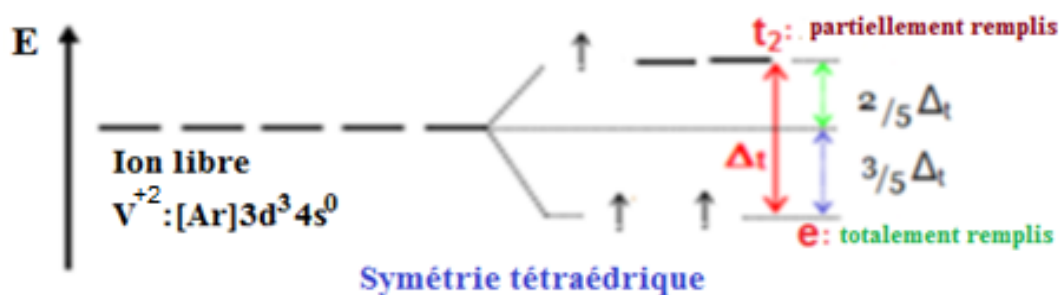


Figure III.3-Eclatement des orbitales 3d de V⁺³ dans la symétrie tétraédrique.

III.3.1-Structure de bandes

Les énergies de structure de bandes polarisée en spin du ternaire Alliages $Zn_{1-x}V_xTe$. Pour $x=0,25$, calculés en utilisant le schéma WC-GGA à leurs paramètres de réseau d'équilibre, comme répertoriés dans le tableau III.1. Le spin majoritaire et minoritaire (spin-up direction vers le haut et spin- down direction vers le bas) des structures de bandes le long des directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin sont représentées sur la figure III.4 pour $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ où le bas de la bande de conduction et le haut de la bande de valence sont au point Γ . Selon la figure III.4 pour le $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$, dans le boîtier en rotation, la bande d'énergie cross le Fermi niveau, comme pour le cas de spin-down, le niveau de Fermi se situe dans l'écart qui confirme la nature semi-métallique de ces alliages.

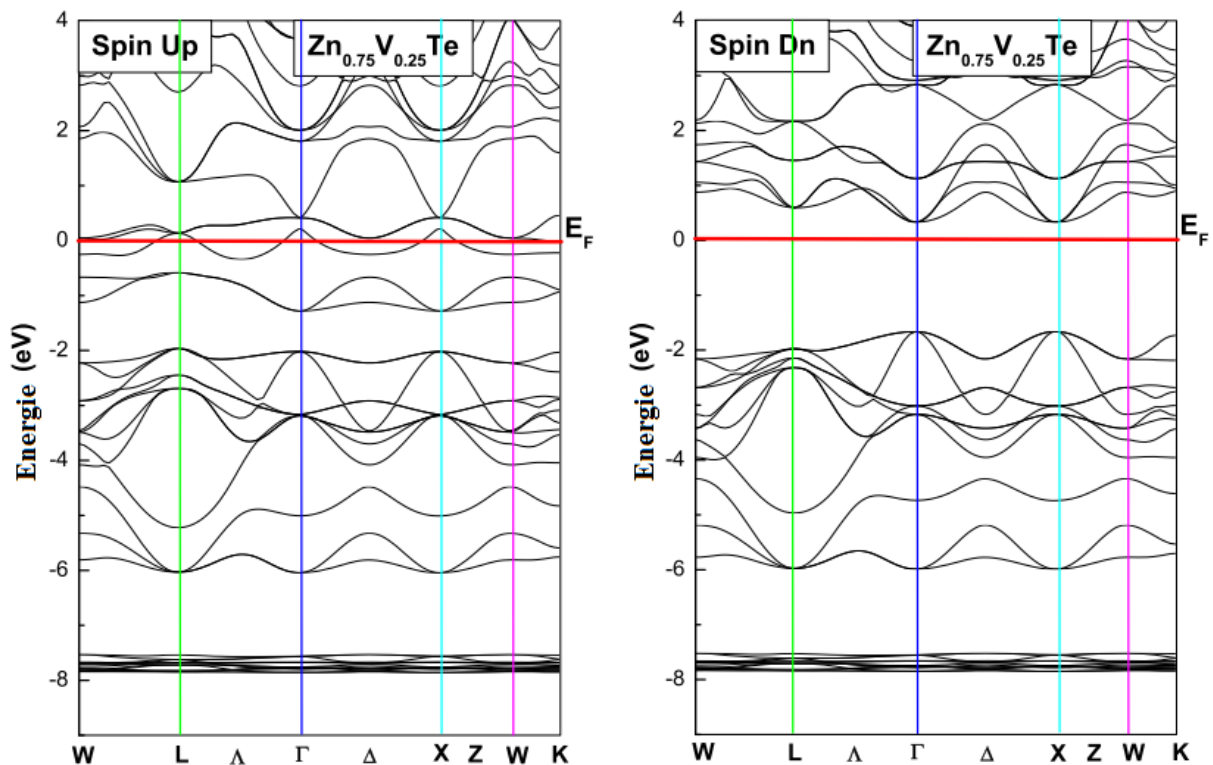


Figure III.4-Structure de bande électronique polarisée en spin de ZB $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ au paramètre de réseau d'équilibre calculé en WC-GGA.

La figure III.4 montre la structure de la bandes de l'alliage $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$; une énergie bande franchit le niveau Fermi pour le cas de spin-down qui démontre et indique que ce composé a un caractère semi-conducteur dans la direction des spins minoritaires et une autre structure conducteur a la direction des spins majoritaires. Ce comportement est dit demi-métallique de nature ferromagnétique.

L'écart d'énergétique du gap E_g demi-métallique est défini comme l'écart entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sur le point de symétrie Γ et le gap demi-métallique ferromagnétique G_h du composé $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ est définie comme le minimum entre les deux valeurs de maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction en valeur absolue par rapport au niveau de Fermi dans la direction des spins down.[21-22]. Le tableau III.2 présente les valeurs de l'écart énergétique de spin-down E_g et l'écart d'énergie demi-métallique (E_{HM}) G_h du composé demi-métallique $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ obtenus en utilisant l'approximation WC-GGA.

Tableaux III.2- Calcul du caractère half-métallique ferromagnétique du gap E_g et half-métallique du gap G_h des spins minoritaires pour $Zn_{1-x}V_xTe$ aux concentrations ($X=0.25$).

Composé	Concentration(x)	Energy Gap(ev)		Type
		E_g	G_h	
$Zn_{1-x}V_xTe$	0,25	1,96	0,34	HMF demi-métal

On peut remarquer que gap large (EHM) à $x=0,25$ prédise qu'une température élevée de Curie peut être attendue dans ces matériaux [23]. Dans le cas de $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$, les états $3d-e_g$ et $3d-t_{2g}$ ont le même rôle en spin-up et spin-down. Plus que le minimum de bande de conduction à la concentration $x=0.25$ de DMS au tellure de Zinc dopé au vanadium situés au niveau de Fermi sur le point Γ , ce qui confère une caractéristique ferromagnétique (FM) purement demi-métallique. Le matériau $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ présente dans les deux directions de spins un caractère purement demi-métallique ceci revient au comportement électronégatif de zinc et de tellure et au caractère ionique de la liaison Zn-Te. Nous concluons que l'insertion de vanadium dans le tellure de Zinc à la concentration $x=0.25$ présente un comportement ferromagnétique demi-métallique et affirme l'utilisation de DMS $Zn_{1-x}V_xTe$ dans la spintronique (voir Figure III.5).

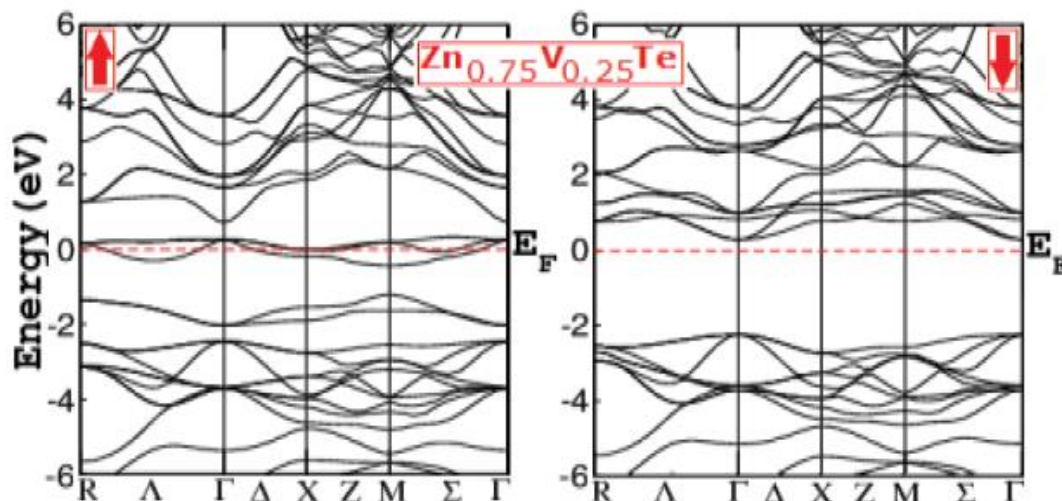


Figure III.5-Structure de bande de $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC [24].

Les structures de bande polarisées en spin peuvent d'écrire deux paramètres importants. Les constantes d'échanges $N_{0\alpha}$ à la bande de conduction (BC) et les constantes d'échanges $N_{0\beta}$ à la bande de valence (BV) et les valeurs de ces constantes estimées pour $Zn_{1-x}V_xTe$ sont présentées dans le tableau suivant.

Tableaux III.3- calcul la bande de conduction (Δ_{Ec}) et valence (Δ_{Ev}); et les constantes d'échanges pour $Zn_{1-x}V_xTe$ à la concentration ($x=0.25$).

Composé	Concentration(x)	$\Delta_x(d)$	$\Delta_x(pd)$	$N_{0\alpha}$	$N_{0\beta}$
$Zn_{1-x}V_xTe$	0,25	1,442	-1,618	0,682	-,236

Le tableau III.3 montre que les états de conduction se comportent dans le sens opposé à la direction d'échange des états de valence. Cependant, les constantes d'échanges négatives pour les états p-d sont cohérentes avec la direction d'échanges p-d négative. Ceux-ci expliquent que le couplage d'échanges entre BV et le métal de transition 3d est antiferromagnétique ; alors qu'il est ferromagnétique entre BC et 3d métal de transition, de sorte que nos matériaux possèdent le caractère ferromagnétique demi-métallique.

III.3.2--Densités d'états électroniques (D.O.S)

Les propriétés électroniques des solides ont été étudiées en détail en utilisant la quantité utile de la densité électronique des états. Les calculs de la densité totale et partielle des états (TDOS et PDOS, respectivement) tracés des alliages $Zn_{1-x}V_xTe$ ($x=0,25$) dans la phase

ferromagnétique à leur réseau d'équilibre les paramètres sont présentés sur les Fig. 6 et 7 pour spin-up et spin-down, près du niveau de Fermi, les alliages exhibent un grand échange de splitting entre la majorité et la minorité des états en direction de spin. Les figures 6 (a) et (b) indiquent que les électrons à spin majoritaires ont une nature métallique pour le $\text{Zn}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Te}$, où une bande interdite apparaît autour du niveau de Fermi pour les états de spin minoritaires qui présentent un caractère semi-conducteur par conséquent, $\text{Zn}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Te}$ sont des composés ferromagnétiques demi-métalliques en nature électronique. Le TDOS de $\text{Zn}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Te}$ est montré sur la figure 6 (c) avec une seule bande d'énergie traversant le niveau de Fermi et les états de conduction présentent un comportement opposé selon le fractionnement de l'échange.

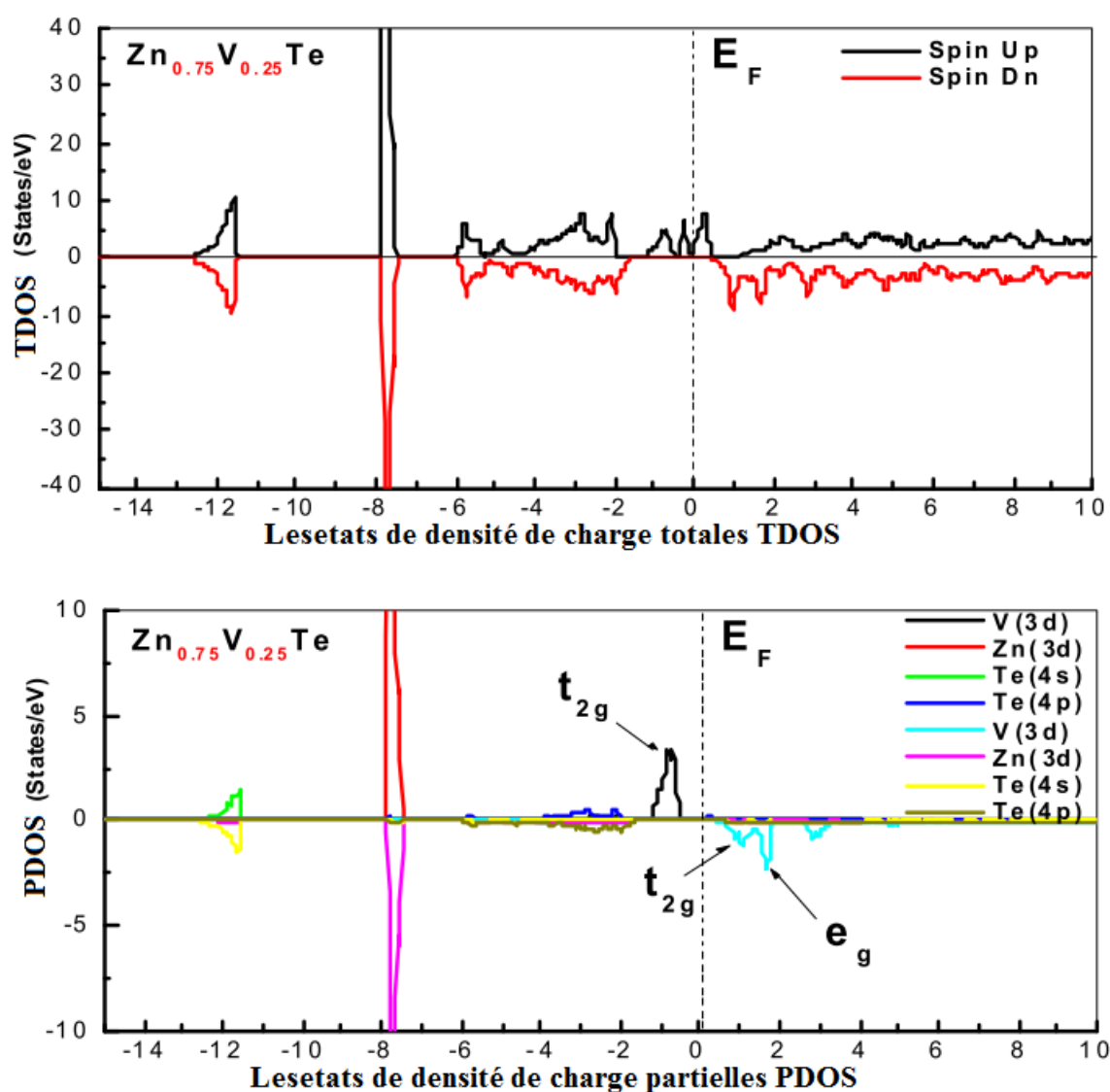


Figure III.6-La densité d'état électronique de $\text{Zn}_{0.75}\text{V}_{0.25}\text{Te}$ calculée par la méthode FP-LAPW avec l'approximation GGA-WC.

III.4-Moment magnétique

En utilisant le WC-GGA, nous avons calculé les moments magnétiques totaux (M_{Tot}) des alliages zinc blende $Zn_{1-x}V_xTe$ ($x=0,25$) en magnéton de Bohr (μ_B). Et les moments magnétiques atomiques de Zn, V et Te, qui sont présentés dans le tableau 6. Les valeurs de moment magnétique M_{Tot} montrent que la principale contribution est due à l'atome V avec les contributions des atomes Zn et Te, qui présente la nature demi-métallique des composés. Nous voyons donc que le champ magnétique atomique moments de V et Te ont des signes opposés en raison de la interaction ferromagnétique entre les spins de valence Te et V. Un tel comportement a également été rapporté par Ge et Zhang [25]. Selon le tableau 6, l'hybridation p – d près du niveau de Fermi diminue le moment magnétique atomique de l'atome V de son valeur de charge atomique de $3 \mu_B$ et crée de petits mouvements magnétiques locaux sur les sites Zn et Te non magnétiques. Les calculs des moments magnétiques totaux et locaux des composés $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ et d'autres résultats théoriques [26] sont représentés dans le(Tableau III.4).

Tableau III.4- Moments magnétiques totale et local (en magnéton de Bohr μ_B) pour $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$.

Composé	Concentration(X)	Interstitial	V	P	Total
$Zn_{1-x}V_xTe$	0,25	0,043	2,518	-0,033	3,00

III.5-Conclusion

Nous avons étudié le comportement structurel, électronique et magnétique des alliages $Zn_{1-x}V_xTe$ ($x=25$) dans la phase B3 en utilisant l'approche FP-LAPW avec dans DFT. Notre prédiction reposait sur les paramètres de réseau d'équilibre révèlent que les alliages $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ sont des composés ferromagnétiques demi-métalliques. Les propriétés du ternaire $Zn_{1-x}V_xTe$ sont calculées pour être utilisés référence pour de futurs projets similaires. Les états V 3d provoquent l'échange de séparation des paramètres Δ_x (d) et Δ_x (pd), qui sont dérivés de TDOS et PDOS. Les valeurs négatives de Δ_x (pd) expliquent que le potentiel effectif de la rotation minoritaire, qui est plus attractif que celui de la rotation majoritaire.

Les constantes d'échange $N_{0\alpha}$ et $N_{0\beta}$ ont été estimés et ont des valeurs de signe opposé, ce qui confirme que les états de valence et de conduction interagissent dans d'une manière opposée pendant le processus de fractionnement des échanges. La forte hybridation entre les états V t_{2g} et Te5p, le moment magnétique atomique de l'atome V est réduit de son atomique charge de $3\mu_B$, et de petits moments magnétiques locaux sont générés sur les sites non

magnétiques Zn et Te. Donc les alliages de tellure de zinc dopés en vanadium sont des candidats promoteurs dans les applications de spintronique.

Bibliographie

- [1] : S.M.S, Kwok, K.Ng.: Physique des dispositifs à semi-conducteurs, 3e édition. Wiley (2007)
- [2] : S.Oktyabrsky,D.Ye.Peide.: Principes de base des MOSFET à semi-conducteurs III-V. Springer(2010)
- [3] : P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, WIEN2K: An Programme Onde plane augmentée + Orbitales locales pour le calcul des propriétés des cristaux (TechnischeUniversit`at, Vienne, Autriche, 2001).
- [4] : Z. Wu et R. E. Cohen, Phys. Rev. B 73 (2006) 235116.
- [5] : F. Tran et P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 226401.
- [6] : S. M. Alay-e-Abbas, N. Sabir, Y. Saeed et A. Shaukat, Int. J. Mod. Phys. B 25 (2011) 3911.
- [7] :N. A. Noor, S. Ali et A. Shaukat, J. Phys. Chem. Solides 72 (2011) 836.
- [8] :F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390.
- [9] :F.D. Muranghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 244.
- [10] :S. Kervan, N. Kervan, J. Magn. Magn. Mater. 382 (2015) 63–70.
- [11] :Y. Saeed, A. Shaukat, S. Nazir, N. Ikram, H. Ali. Reshak, J. Sol. State Chem. 83 (2010) 242–249.
- [12] :F. Tran, R. Laskowski, P. Blaha, K. Schwarz, Phys. Rev. B75 (2007) 115131.
- [13] :F. Annane, H. Meradji, S. Ghemid, F. El Haj Hassan, Comput. Mater. Sci. 50(2010) 274–278.
- [14] :F. Heyd, J.E. Peralta, G.E. Scuseria, R.L. Martin, J. Chem. Phys. 123 (2005) 174101.
- [15] : S.Q. Wang, H.Q. Ye, Phys. Rev. B 66 (2002) 235111.
- [16]: O.Madelung (Ed.), Umerical Data and Functional Relation Ships in Science and Technology, vol.17, L et olt-Bornste in, New Series, Group III, Springer-Verlag, Berlin, 1987 (Partsa and b, 1982; vol.22, Parta).
- [17]: S.H. Wei, A.Zunger, Phys.Rev.B60 (1999) 5404.
- [18]: N.E.Christensen, O.B.Christensen, Phys.Rev.B33 (1986) 4739.
- [19] :J. Szczytko, A. Twardowski, K. Swiatek, M. Palczewska, M. Tanaka, T. Hayash, K. Ando, Phys. Rev. B 60 (1999) 8304.
- [20] : Y. Sasaki, X. Liu, J.K. Furdyna, M. Palczewska, J. Szczytko, A. Twardowski, J.Appl. Phys. 91 (2002) 7484.
- [21] :K.L. Yao, G.Y. Gao, Z.L. Liu, L. Zhu, Solid State Commun. 133 (2005) 301.

[22] : G.Y. Gao, K.L. Yao, E. Sasioglu, L.M. Sandratskii, Z.L. Liu, J.L. Jiang, Phys. Rev. B 75 (2007) 174442.

[23] : J. Kübler, Phys. Rev. B 67 (2003) 220403R.

[24] : M.Sajjad et al, Modern Physics Letters B, Vol. 28, No. 13 (2014) 1450104 (14 pages)c

[25] : X.-F. Ge, Y.-M. Zhang, J. Magn. Magn. Mater. 321 (2009) 198.

[26] :Y. Saeed, A. Shaukat, S. Nazir, N. Ikram, H. Ali. Reshak, J. Sol. State Chem. 83 (2010) 242–249.



Conclusion générale

Nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques et magnétique de composé ZnTe à leurs états binaires et ses DMS(s) comme composés ternaires dopés par l'élément 3d soit le vanadium (V) de la famille des semi-conducteurs II-VI dans la phase de zinc blende à la concentration $x= 0.25$. Nous avons utilisé la méthode des ondes plan augmentée et linéarisée avec le potentiel complet (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en traitement l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation du gradient généralisée (GGA-WC), implémentée dans le code Wien2k. Les calculs théoriques sont en mesure d'apporter un appui à l'expérience en confirmant des hypothèses ou en apportant une interprétation fondamentale à un phénomène concret. Les principaux résultats obtenus sont :

➤ Propriétés structurales

Dans notre étude des propriétés structurales, nous avons calculé le paramètre de maille à l'équilibre (**a**), le module de compression à l'équilibre (**B**), la première dérivée de module de compressibilité par rapport à la pression (**B'**). Nos résultats concernant les propriétés structurales de l'état d'équilibre sentent en bon accord avec les données expérimentales et d'autres calculs théoriques.

➤ Propriétés électroniques et magnétiques

Le calcul des structures électroniques nous fournit des significations très intéressantes qui nous ont permis de constater en détails, le caractère demi-métallique ferromagnétique de ces matériaux. Cette constatation a montré que les spins majoritaires sont métalliques à cause de l'existence d'une forte hybridation entre les états 5p d'atome (Te) et état 3d de l'atome (V) vanadium qui dominant le niveau de Fermi. Ils sont caractérisés par un gap demi-métallique, le moment magnétique total pour chaque composé est un nombre entier à 3 magnétons de Bohr, ce qui confirme que la totalité de magnétisation revient à l'atome de dopage.

En fin nos matériaux DMSs issus du tellure de zinc possède un large caractère demi-métallique ferromagnétique avec une polarisation en spin magnétique égales à 100% semblent d'être de bons candidats pour les applications de l'électronique spin.

Etude du caractère demi-métallique ferromagnétique par la méthode FP-LAPW des alliages ZnTe dopés en vanadium

Résumé : Dans ce manuscrit, on a étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés de la famille ZnTe comme semi-conducteurs dilués ternaire (DMS) $Zn_{1-x}V_xTe$ avec concentration $x=0.25$ dans la phase de zinc blende. On a utilisé le code wien2k basé sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT), le formalisme des ondes planes augmentées linéarisée (FP-LAPW). L'énergie d'échange et de corrélation est évaluée dans le cadre de l'approximation de gradient généralisé (GGA-WC). Nous avons repris les propriétés physiques des semi-conducteurs ZnTe. Nos résultats des propriétés électroniques et magnétiques utilisant la densité d'états totale et partielle et la structure de bande montrent que le $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ est demi-métallique ferromagnétique et qu'il déduit un moment magnétique totale égales à $3\mu_B$ qui procède les atomes V.

Mots clés : semi-conducteur, DFT, liaison ionique, demi-métallique, spintronique.

Study of the semi-metallic ferromagnetic character by the FP-LAPW method of ZnTe alloys doped with vanadium

Abstract: In this manuscript, we have studied the structural, electronic and magnetic properties of the ZnTe family as ternary diluted semi-conductors (DMS) $Zn_{1-x}V_xTe$ with concentration $x=0.25$ in the zinc blend phase. We have used the wien2k code based on the density functional theory (DFT), the formalism of full-potential linearized augmented plan wave. The exchange correlation energy was estimated under the gradient generalized approximation (GGA-WC). We have taken up the physical properties of ZnTe semi-conductors. Our results of the electronic and magnetic properties using the total and partial state density and the band structure show that $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ is half-metallic ferromagnetic and that deduce a total magnetic moment equal to $3\mu_B$ which originate mainly from V atoms.

Keys words: semi-conductors AIP, DFT, ionic bond, half-metallic, spintronic.

دراسة الطابع المغناطيسي الحديدي شبه المعدني بطريقة المشبعة بالفاناديوم FP-LAPW لسبائك ZnTe

ملخص: في هذه المخطوطة، درسنا الخصائص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية لمركبات عائلة ZnTe باعتبارها أشباه يتم موصلات ثلاثي مخففة (DMS) $Zn_{1-x}V_xTe$ بتركيز $x=0.25$ في مرحلة مزيج الزنك. استخدمنا كود wien2k على أساس تظهر نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) الشكلية للموجات المستوية الخطية المعززة (FP-LAPW). تقييم طاقة التبادل والارتباط في هي اطار تقريب التدرج المعمم (GGA-WC) لقد استخدمنا الخصائص الفيزيائية لأشباه الموصلات ZnTe نتائجنا للخصائص الإلكترونية والمغناطيسية باستخدام الكثافة الكلية والجزئية للحالة وبنية النطاق أن $Zn_{0.75}V_{0.25}Te$ مغناطيسية شبه معدنية وأنهم يستنتجون عزم مغناطيسي إجمالي يساوي $3\mu_B$ والذي يؤدي إلى الذرات V

الكلمات المفتاحية: أشباه الموصلات نظرية الكثافة الوظيفية، الرابطة الأيونية، نصف معدني، الإلكترونات الدورانية