

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de

La Recherche Scientifique



Université de Saïda

Dr Moulay Tahar



Mémoire de Fin d'études

En vue de l'obtention du diplôme de Master II en Physique

Filière : Science de la matière

Spécialité : Physique des Rayonnements

Présenté par :

Karima Hachemi

Thème

Caractère demi-métallique ferromagnétique de dopage
du chrome dans l'arséniure de gallium

Soutenu le 29/06/2021 devant le jury composé de :

Djaafri Tayeb	MCA	Président	Université de Saida
Boutaleb Miloud	MCA	Encadreur	Université de Saida
Boutaleb Habib	MCA	Examineur	Université de Saida

Année universitaire 2020/2021

Remerciement

Ce travail a été réalisé au département de physique

Grâce à Dieu, j'ai atteint ce point, et merci à Dieu toujours

Je tiens à remercier Monsieur Boutaleb Miloud, Docteur à l'Université de Saïda, qui m'a encadré tout au long de travail et qui m'a fait partager ses brillantes intuitions. Qu'il soit aussi remercié pour sa gentillesse, sa disponibilité permanente et pour les nombreux encouragements qu'il m'a prodigués.

Mes vifs remerciements vont aux membres de jury Dr. Djaafri Tayeb et Dr. Boutaleb Habib, pour avoir accepté de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

Bien sur, je ne peux pas oublier de dire merci pour mes parents et je dire atteindre ce travail n'aurait pas été possible sans soutien et leurs prières, et je vous dire merci mes sœurs, mes frères et toute la famille Hachemi. Et à tous ceux qui m'ont aidé avec quoi que ce soit, même avec mot gentil.

Enfin, je tiens à remercier chaleureusement tous mes amis, collègues et en même temps tous les membres du Département de Physique.



A Tous, un Grand Merci.

Table des matières

REMERCIEMENTS

SOMMAIRE

LISTE DES FIGURES

LISTE DES TABLEAUX

Introduction générale 1

Chapitre I : Généralité sur les semi-conducteurs

I. Notions générales sur les matériaux semi-conducteurs.....	3
I.1 Classification des matériaux	4
I.1.1 Les matériaux isolants	5
I.1.2 Les matériaux conducteurs	5
I.1.3 Les matériaux Semi-conducteurs	6
I.1.3.1 Interaction rayonnement semi –conducteur	7
I.1.3.2 Mécanisme de conduction.....	7
I.2 Le niveau de Fermi	7
I.3 Structure de bandes de semi-conducteur	10
I.4 L'énergie de Gap des semi –conducteurs.....	10
I.5 Gap direct et indirect	10
I.6 Les groupes des semi-conducteurs	11
I.6.1 Les semi-conducteurs IV	11
I.6.2 Les semi-conducteurs II-VI	12
I.6.3 Les matériaux semi-conducteurs III-V.....	12
I.7 Les types de semi –conducteurs.....	13
I.7.1 Semi-conducteur intrinsèque ou pur	13
I.7.2 Semi-conducteur extrinsèque ou dopé	13
I.8 Les propriétés structurelles de semi-conducteur	14
I.8.1 Zones de Brillouin	14
I.8.2 La structure zinc blende	15
I.8.3 La maille wurtzite.....	16

I.9 Définitions des matériaux étudiés	17
I.9.1 L'arséniure de gallium (GaAs)	17
I.9.2 Structure cristalline.....	17
I.9.3 Quelques propriétés de GaAs	18
I.10 Le chrome	19
I.10.1 Introduction	19
I.10.2 Domaines d'utilisation du chrome	19
I.10.3 Toxicité	20
I.10.4. Propriété physico-chimique de chrome	20
1.10.4.1 Propriété chimique.....	20
I.10.4.2 Propriété physique.....	21
I.11 La spintronique et semi-conducteurs magnétiques dilués	21
I.11.1 Définition de la spintronique.....	21
I.11.2 Définition de spin	22
I.11.3 Les matériaux ferromagnétiques	22
I.11.4 La magnétorésistance géante (GMR)	23
I.11.5 La magnétorésistance tunnel (TMR).....	25
I.11.5.1 Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM)	26
I.12 Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)	27
I.12.1 Introduction	27
I.12.2 Définition de DMS.....	28
I.12.3 Injection à l'interface métal ferromagnétique –Semi-conducteur.....	28
I.12.4 Classification de semi-conducteurs magnétiques dilués	29
I.12.5 Température de Curie	31
I.12.6 Les avantages des DMS à base de semi-conducteurs III-V.....	32
Référence	33

Chapitre II : Théorie et méthodes de calcul

II.1 Introduction	37
II.2 La théorie de la Fonctionnelle de la Densité	37
II. 3 La méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW)	38
II.3.1 La méthode des ondes planes augmentées (APW)	39
II.3.1.1 Historique de la méthode des Ondes Planes Augmentées (APW).....	39
II.3.1.2 Principe de la méthode des Ondes Planes Augmentées(APW).....	39

II .3.2	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW)	42
II .3.2.1	Les avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW.....	44
II .3.3	Le principe de la méthode FP-LAPW	44
II.4	Rôles des énergies de linéarisation (E_i)	45
II.5	Le code WIEN2k	46
II.6	L'approximation du gradient généralisé(GGA).....	48
	Référence	49

Chapitre III : Résultats de calcul et interprétations

III.1	Introduction.....	50
III.2	Propriétés structurales	50
III.3	Paramètres d'équilibre.....	52
III.4	Propriétés électroniques des semi-conducteurs $Ga_{1-x}Cr_xAs$	54
III.4.1	Champ cristallin tétraédrique	54
III.4.2	Structure de bandes	55
III.4.3	Densité d'états électroniques (DOS).....	60
	Référence	63
	Conclusion générale	64

Liste des figures

Figure I.1	La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de matériaux.....	5
Figure I.2	Résistivité des différents matériaux	7
Figure I.3	Structure en bandes d'énergie des matériaux ; isolants, semi-conducteurs et conducteurs.....	9
Figure I.4	Structure de bande d'un semi-conducteur à gap (a) direct et (b) indirect.....	11
Figure I.5	Extrait du tableau périodique des éléments chimiques et composition en SC binaires suivant leurs groupes.....	13
Figure I.6	a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de Gap	15
Figure I.7	Mailles élémentaires de la structure zinc blende.....	15
Figure I.8	Mailles élémentaires de la structure wurtzite.	16
Figure I.9	Maille élémentaire de deux types de structures zinc blende du GaAs.....	17
Figure I.10	Densité d'états en fonction de l'énergie pour les bandes de conduction (dans un métal ferromagnétique)	23
Figure I.11	Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.....	24
Figure I.12	Modèle de Mott à deux canaux.....	25
Figure I.13	Architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonctions tunnels Magnétiques.....	27
Figure I.14	(a) Semi-conducteurs où les éléments magnétiques forment un périodique. b) Semi-conducteurs traditionnels sans éléments magnétiques .c) Semi-conducteurs magnétiques dilués où les éléments magnétiques sont répartis d'une manière aléatoire	29
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.....	40
Figure II.2	Le code Wien2k.	46

Figure III.1	Maille élémentaire de GaAs en phase zinc blende.....	51
Figure III.2	Variation de l'énergie totale du GaAs en fonction du volume.....	52
Figure III.3	Disposition spatiale des cinq orbitales d.	55
Figure III.4	Influence du champ cristallin sur les niveaux d'énergie des orbitales d de champ Tétraédrique	55
Figure III.5	La structure de bande de composé GaAs avec un gap direct.	56
Figure III.6	Les structures de bandes d'énergie (\uparrow up et \downarrow down) calculées pour dopage $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ dans la phase zinc blende avec l'approximation (GGA).....	59
Figure III.7	Structures de bandes polarisées en spin pour le spin (up) et Spin (down) Pour le niveau de Fermi est mis à zéro.....	60
Figure III.8	Les états DOS partielles et totales des spins majoritaires (up) et spin minoritaires down) de $(\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As})$	61
Figure III.9	Les états DOS partielles et totales des spins majoritaires (up) et spins minoritaires (down) de $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$	62

Liste des tableaux

Tableau I.1	Quelques propriétés physiques de l'arséniure de gallium	18
Tableau I.2	Propriétés physiques du chrome	21
Tableau III.1	Calcul de la constante de réseau (a), module de volume (B) et de son dérivé de pression (B') pour GaAs et $Ga_{1-x}Cr_xAs$ aux concentrations.....	53
Tableau III.2	Les valeurs du gap énergétique pour le GaAs et alliages $Ga_{0.75}Cr_{0.25}As$ et $Ga_{0.875}Cr_{0.125}As$	58

Introduction générale

Les semi-conducteurs sont omniprésents et pèsent dans notre vie quotidienne joué un rôle décisif dans l'économie. Il est la source d'une révolution silencieuse, Dans le cadre de la croissance économique mondiale depuis un demi-siècle. Le monde des semi-conducteurs est dominé en termes de marché par le silicium (Si). Mais plusieurs concurrences sont apparues récemment, dont les matériaux III-V. Nous intéressant que le composant l'arséniure de gallium (GaAs) s'avère un des matériaux les plus prometteurs, de par ses propriétés optoélectroniques, physiques et thermiques très intéressantes, qui ouvrent un vaste champ d'application et de développement de dispositifs à semi-conducteurs.

En 1954, des obstacles physiques fondamentaux apparaissent à formé les transistors, ces transistors comme une innovation technologique majeure tendant à révolutionner en physique fondamentale mais il n'a que peu d'impact. C'est pourquoi nous essayons de trouver de nouveaux domaines de recherche pouvant remplacer l'électronique traditionnelle à l'échelle nanométrique. Les appareils Spintronique sont l'une des alternatives intéressantes, utilisez non seulement, la charge mais aussi le spin de l'électron pour coder les informations, après la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) par (A. Fert et P. Grünberg) a déclenché le développement de la spintronique, par la suite une expansion continue tel que la magnétorésistance tunnel (TMR). Néanmoins, la spintronique est confrontée à plusieurs défis.

La manipulation simultanée du spin et de la charge des électrons requiert des matériaux innovants en vue de réaliser de nouveaux composants pouvant répondre aux contraintes de performance et de miniaturisation. Parmi ces matériaux, les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), forment une nouvelle classe de matériaux magnétiques, qui remplissent l'écart entre les ferromagnétiques et les semi-conducteurs. Ils s'agissent des semi-conducteurs dans lesquels des atomes magnétiques sont introduits (métaux de transition ou terres rares) en faible quantité. Ceci permet au semi-conducteur de gagner des propriétés magnétiques tout en gardant ses propriétés électriques.

La théorie fonctionnelle de la densité (DFT) est un formalisme alternatif de la première quantification utilisant les fonctions d'ondes. Cette méthode employée pour résoudre le problème électronique. Ses applications sont innombrables comme par exemple: structure de bandes en physique du solide, propriétés magnétiques de certains alliages, énergies de liaisons moléculaires en chimie.

Le but de ce travail est d'étudier le comportement structurale et les propriétés électroniques des semi-conducteurs magnétiques dilués de type III.V. Le mémoire s'organise autour de trois chapitres :

Le premier chapitre est divisé en deux parties, d'abord la première partie contient des généralités sur les propriétés des semi-conducteurs et la seconde partie présente les définitions des matériaux étudiés. Elle contient les enjeux spintronique et une introduction aux semi-conducteurs magnétiques dilués.

Le deuxième chapitre est consacré aux méthodes Ab-Initio qui permet l'étude des propriétés structurales et électroniques des matériaux DMS. La théorie de la fonctionnelle de densité et les différentes approximations utilisées dans notre travail sera décrite.

Le troisième chapitre résume les résultats et les interprétations de nos calculs apportés sur les propriétés structurales et électroniques du GaAs comme semi-conducteur binaire, aussi les propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires dopés en chrome.

Pour en finir, une conclusion résumant tout le travail et exposant les perspectives possibles dans cet axe vient pour éclaircir le chemin à suivre aux futurs preneurs.

Chapitre /

Étude théorique des matériaux semi-conducteurs

I Notions générales sur les matériaux semi-conducteurs :

Pendant très longtemps les scientifiques croyaient que vis-à-vis de la conduction électrique, les matériaux se subdivisaient en deux classes – conductrices et diélectriques (isolants). Cependant, vers 1830 on a découvert des matériaux dont les propriétés ne permettaient de les classer dans aucune de ces catégories. À l'état pur, ces matériaux étaient à la fois de mauvais conducteurs et de mauvais isolants : or leurs propriétés électriques, notamment la résistivité, variaient très sensiblement sous influence des facteurs extérieurs de l'environnement (température, pression...), de la présence des impuretés, de la lumière, etc... En occupant une place intermédiaire entre les conducteurs et les isolants, ces matériaux ont été appelés « semi-conducteurs ». Pour comprendre la nature et les propriétés des semi-conducteurs, il conviendrait de revoir les notions de la physique quantique et la physique des solides.

Le fonctionnement des composants électroniques réalisés à l'aide des matériaux ou alliages semi-conducteurs est en relation directe avec la théorie des atomes. L'explication actuelle que nous donnent les physiciens sur la matière met en jeu que les particules qui composent l'atome sont organisées avec un noyau, et contient des protons et des neutrons accompagné autour d'un nuage de petits électrons qui gravitent au loin, à des distances bien définies appelées couches électroniques. Chaque proton ou neutron, appelés tous deux nucléons, est d'un diamètre et d'une masse environ 2000x supérieure à un électron.

Une des lois fondamentales de la mécanique quantique, le principe d'exclusion de Pauli Fermi, interdit l'occupation d'un état énergétique par plus de deux électrons. Par conséquent, une bande est considérée comme remplie une fois que deux électrons occupent chacun de ses états. A la température du zéro absolu, s'il n'y pas de recouvrement des bandes, toutes les bandes sont remplies jusqu'à une bande qui s'appelle la bande de valence (BV). La première bande plus haute en énergie est entièrement vide à $T = 0$ K; elle s'appelle la bande de conduction (BC). Aux températures élevées, des électrons peuvent être excités thermiquement de la bande de valence à la bande de conduction.

Le déplacement des électrons dans un solide sous l'effet d'une tension (un champ électrique) se manifeste par un courant électrique. La conductivité électrique (ainsi que son

inverse, la résistivité) permet de relier la tension et le courant (ce qui correspond à loi d'Ohm dans le cas d'une structure purement résistive). Des électrons en mouvement occupent des niveaux plus élevés en énergie que ceux qui sont localisés. La disponibilité des niveaux correspondants aux énergies élevées et leur taux d'occupation sont donc décisifs pour la conduction. Ceci implique que des bandes entièrement remplies ne peuvent pas contribuer à la conduction, mais que des électrons dans la bande de conduction et/ou des niveaux libres dans la bande de valence (appelés des "trous") sont requis.

I.1 Classification des matériaux :

La conductivité électrique dépend, en outre, de la température, de la radiation électromagnétique, du champ magnétique et de toute forme d'irradiation et de défaut [1]. Ce sont des variations de la conductivité électrique, sous l'effet d'influences variées, qui font des semi-conducteurs des matériaux importants pour l'électronique et ses applications.

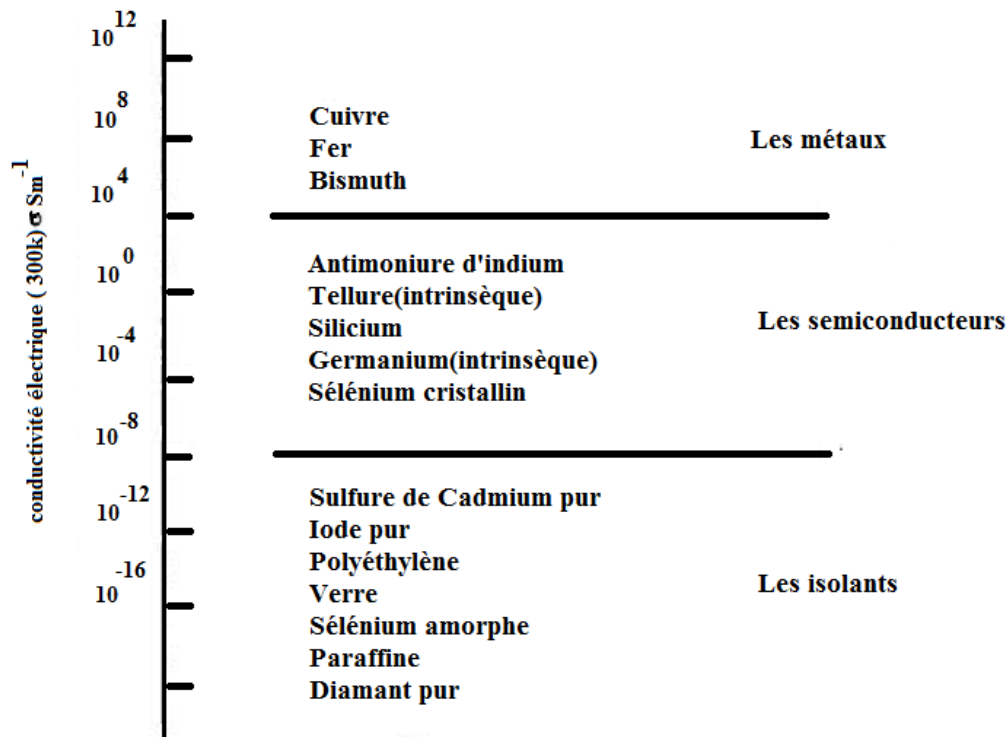


Figure I.1-La conductivité électrique à température ambiante de quelques types de Matériaux.

L'utilisation des matériaux passe de l'empirique à la technologie de pointe. Les matériaux contiennent généralement des défauts, tels que des joints de grains, des emplacements lacunes et dislocations.

Une manière commune de classer un matériel est par ses propriétés électriques. Selon le niveau de la résistivité d'un élément, elle peut être classée par catégorie comme isolateur, conducteur, ou semi-conducteur.

I.1.1 Les matériaux isolants :

Généralement, les isolants sont des matériaux qui limitent les échanges d'énergie entre deux systèmes. Et spécifiquement les isolants électriques sont appelés aujourd'hui des matériaux diélectriques qui interdit le passage du courant entre deux matériaux conducteurs car ils contiennent très peu d'électrons libres [2] ce qui signifie qu'il est très facile d'établir un champ électrique mais très difficile de faire passer un courant car la bande de conduction est vide. C'est pour cette raison que les isolants possédant une résistivité ρ très élevée à $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$.

Un isolant parfait aurait ainsi en théorie une résistance infini, c'est le cas pour la silice (SiO_2), le verre, le papier, le bois, la pierre. Alors l'augmentation de la température peut provoquer la libération d'électrons (ainsi les trous) qui peuvent participer de la conduction électrique, ce qui provoque une baisse de la résistivité avec la température [3].

I.1.2 Les matériaux conducteurs :

Les phénomènes de transport électrique se produisent dans les bandes d'énergie occupées par les électrons qui possèdent les énergies les plus élevées. En effet, les électrons se trouvant dans les bandes de basse énergie correspondent aux électrons des couches électroniques profondes et sont trop liés aux noyaux pour pouvoir se déplacer dans un cristal. Si les électrons possédant les énergies les plus élevées peuvent, au prix de l'acquisition d'une énergie infinitésimale, sauter sur un niveau d'énergie libre et permis, et se déplacer dans le cristal facilement on parle donc du matériau étant un **conducteur** d'électricité, les meilleurs conducteurs sont des matériaux constitués d'un seul élément comme le cuivre (Cu), l'argent (Ag), l'or (Au) et l'aluminium (Al)...., leurs conductivité est supérieure à 10^5 S/m [4].

I.1.3 Les matériaux Semi-conducteurs :

Les matériaux semi-conducteurs constituent la base de l'industrie de l'électronique grâce à la possibilité de fabriquer des microstructures dont la disponibilité ou le passage des électrons peut être contrôlé de manière précise (dopage) en appliquant des faibles tensions et courants. Le silicium (Si), un élément du 4ème groupe principal du tableau périodique, est à la base de la plupart des dispositifs de microélectronique. Les dispositifs microélectroniques de base sont des diodes et des transistors. Pour établir des circuits intégrés, des grands disques ("wafers", d'un diamètre jusqu'à 450 mm) de la matière monocristalline sont fabriqués. Ensuite, par des techniques de micro-fabrication, des circuits comprenant des centaines des millions de transistors par cm^2 sont réalisés.

Les semi-conducteurs sont des matériaux minérales ou organiques, qui ont la capacité de contrôler leur conduction en fonction de la structure chimique, de la température, de l'illumination et de la présence de dopants, Le nom de semi-conducteur vient du fait que ces matériaux sont ni tout à fait des conducteurs d'électricité, ni tout à fait des isolants. Il peut être soit l'un, soit l'autre selon diverses conditions comme (aluminium, gallium, etc.).

Les semi-conducteurs sont caractérisés par leur bande interdite ou gap, qui sépare les derniers états occupés de la bande de valence et les états libres suivants dans la bande de conduction. Les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande valence ont une énergie qui dépend de leur vecteur d'onde et à résistivité à ce dernier varie de 10^{-3} à $10^4 \Omega \cdot \text{Cm}$ [5].

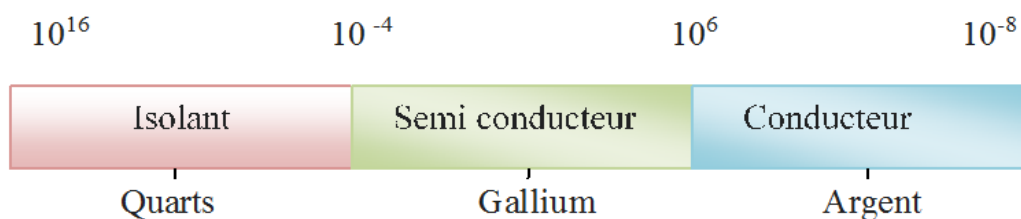


Figure I.2- Résistivité des différents matériaux.

I.1.3.1 Interaction rayonnement semi –conducteur :

L'interaction du rayonnement avec les électrons d'un semi-conducteur se manifeste selon trois processus :

1. **Absorption fondamentale** : Lorsque le photon absorbé provoque un saut d'électron d'un état occupé de la bande de valence vers un état vide de la bande conduction, on dit qu'il y a absorption.
2. **Émission spontanée** : Lorsqu'un électron de la bande de conduction retombe spontanément sur un état vide de la bande de valence, il y'a émission spontanée.
3. **Émission stimulée** : Si le photon absorbé induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de bande de valence avec émission d'un photon, l'émission est dite stimulée.

I.1.3.2 Mécanisme de conduction :

L'excitation d'un électron par un photon de la bande valence vers la bande de conduction laisse apparaître un trou. Ce dernier est comblé par un autre électron et ainsi de suite, tout se passe comme si le trou se déplace en sens opposé de celui de l'électron.

I.2 Le niveau de Fermi :

Le niveau de fermi est une caractéristique propre à un système qui traduit la répartition des électrons dans ce système en fonction de la température. La notion de niveau de Fermi est utilisée en physique et en électronique, notamment dans le cadre du développement des composants semi-conducteurs. Il soit probablement que l'électron occupe l'état énergétique E à la température T obéit aux statistiques de Fermi-Dirac.

$$f(E) = \frac{1}{1+e^{(E-E_F)/kt}} \quad (\text{I.1})$$

Où E_f Niveau de Fermi [eV], il correspond à une probabilité d'occupation égale à $1/2$ quelle que soit la température T .

k : Constante de Boltzmann [$1.38 \times 10^{-23} \text{J} \cdot \text{K}^{-1}$]

T : Température en absolue K

Il en résulte que la probabilité pour que cet état ne soit pas occupé par un électron soit, $1 - f(E)$ (le complément de 1 de $f(E)$).

$$f(E) = 1 - f(E) = \frac{1}{1 + e^{-(E - E_F)/kT}} \quad (\text{I.2})$$

Cette fonction représente par conséquent la fonction de distribution des trous dans le semi-conducteur est une caractéristique propre à un système qui traduit la répartition des électrons dans ce système en fonction de la température.

I.3 Structure de bandes de semi-conducteur :

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction. La figure I.3 montre les diagrammes d'énergie pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur. On observe à la partie a) un vaste écart énergétique entre les bandes. Les électrons de valence ne peuvent sauter vers la bande de conduction sauf lors d'une détérioration provoquée par des tensions extrêmement élevées appliquées au matériau. À la partie b), on remarque qu'un semi-conducteur possède un écart énergétique plus restreint, permettant à quelques électrons de sauter vers la bande de conduction et de devenir des électrons libres. Par contraste, la partie c) illustre les bandes énergétiques se chevauchant dans un conducteur. Dans un matériau conducteur, il existe toujours un grand nombre d'électrons libres.

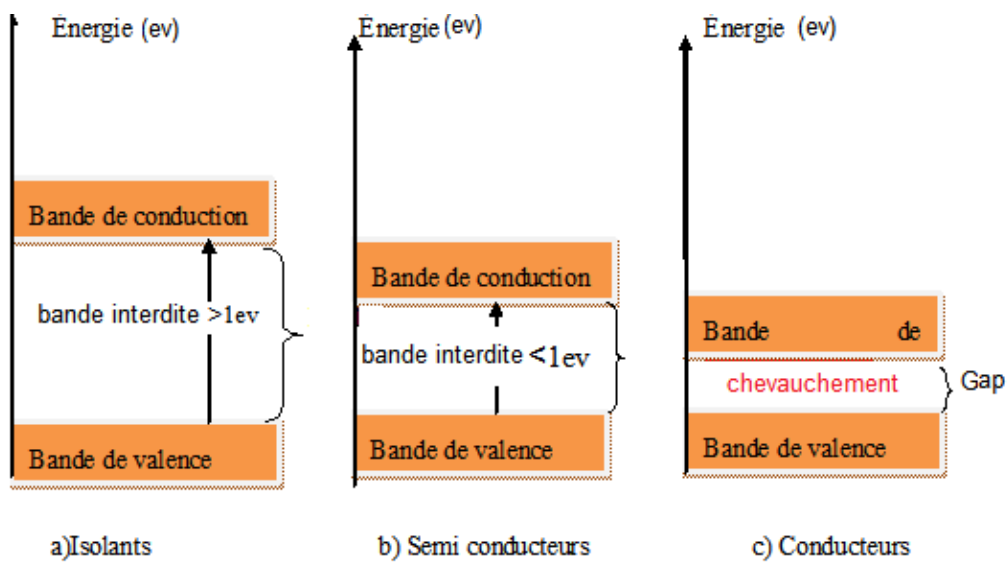


Figure I.3- Structure en bandes d'énergie des matériaux ; isolants, semi-conducteurs et conducteurs [6].

Ce modèle indique que les électrons dans un solide ne peuvent absorber que des valeurs d'énergie contenues à certains intervalles, appelés «bandes». Il y a deux bandes de fréquences autorisées: une la basse énergie est appelée la bande de valence (BV), et l'autre haute énergie est appelée bande de conduction (BC) [7] (les électrons atteignant la bande de conduction peuvent contribuer au courant). Chacune de ces deux bandes de fréquences a une amplitude dépend de l'énergie E (appelée densité d'état N_C et densité N_V), elles correspondent à peut être utilisé pour les électrons (BC) et les trous (BV), leurs expressions sont-elles correspondent à la place disponible pour les électrons (dans la BC) et les trous (dans la BV), leurs expressions sont données par:

$$N_C(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_C}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.3})$$

$$N_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_V}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.4})$$

E : énergie (eV).

E_C, E_V : énergie du bas de la BC et du haut de la BV (eV).

\hbar Constante de Planck réduite ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$) = 6.62×10^{-34} [J. s].

m_c, m_v Masse effective de densité d'états dans les bandes de conduction et de valence.

I.4 L'énergie de Gap des semi-conducteurs :

Entre ces deux bandes existe une bande interdite qui est la différence entre la bande de conduction et la bande de valence ($E_{BC} - E_{BV}$) [8]. La largeur correspondante (E_g) appelée **gap** est un paramètre qui permet de caractériser le semi-conducteur.

Le matériau sera appelé semi-conducteur si la bande de valence soit totalement saturée et la bande de conduction soit totalement vide, ce cas définit une bande interdite beaucoup plus petite que celle des isolants de sorte qu'un champ électrique suffisant ou une température suffisante peuvent faire passer un électron de la BV à la BC et ainsi le transformer en conducteur.

I.5 Gap direct et indirect :

La famille des matériaux semi-conducteurs (isolants à bande interdite de l'ordre de 1eV) peut être divisée en deux catégories: les matériaux à gap direct, tels que la plupart des composés des colonnes III et V du tableau périodique des éléments chimiques, et les matériaux à gap indirect, tels que le silicium (colonne IV).

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique et par suite dans le fonctionnement des composants optoélectronique, représentées sur (la figure I.4) font apparaître deux types fondamentaux de semi-conducteur.

Gap direct : Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont face à face (au même vecteur d'onde $\sim k$) ou situé sur le même point de symétrie.

Gap indirect : Le maximum de la bande de valence n'est pas en face du minimum de la bande de conduction (ils correspondent à des vecteurs d'onde $\sim k$ différents) ; c'est à dire ne sont pas situés sur le même point de symétrie.

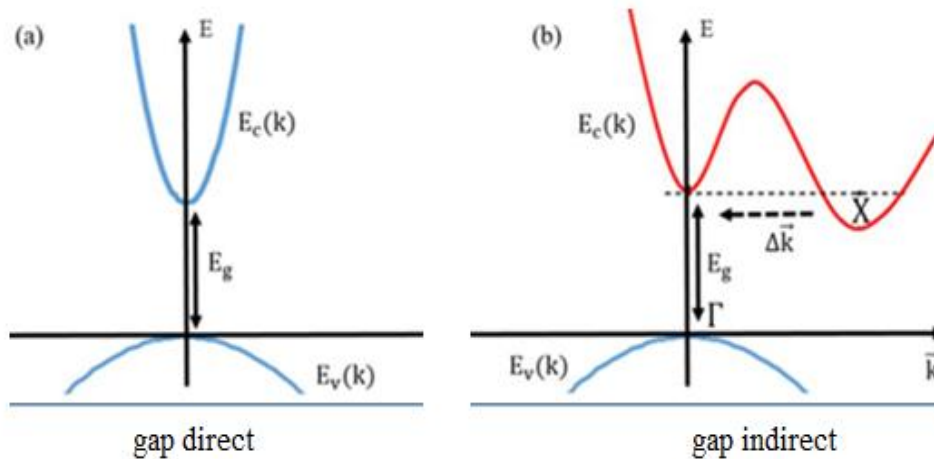


Figure I.4 - Structure de bande d'un semi-conducteur à gap (a) direct et (b) indirect.

Il est utile de mentionner que dans un métal, les deux bandes de BV et BC se chevauchent il en résulte que l'écart E_g est égal à zéro.

1.6 Les groupes des semi-conducteurs :

Les matériaux semi-conducteurs sont des isolants à zéro absolu et des conducteurs finis mise sous tension à température ambiante. Ils peuvent être dopés avec des impuretés pour changer leurs propriétés électriques. Les matériaux semi-conducteurs les plus courants sont solides inorganiques cristallins qui peuvent être classés selon leurs groupes atomiques se réconcilier. La figure 1.5 illustre cette classification, où les chiffres romains désignent dans les colonnes I, II, III, IV, V, VI, etc. du tableau périodique. Il existe la famille des semi-conducteurs très gros car il provient de semi-conducteurs covalents, la quatrième colonne ; semi-conducteurs double polarité III-V, II-VI, I-VII; puis tripolaire III-III-V, III-V-V; également polaire quaternaire ou même II-IV-V₂ Ou I-III-VI₂. Quaternaire ou même II-IV-V₂ Ou I-III-VI₂.

I.6.1 Les semi-conducteurs IV :

Les semi-conducteurs IV comme le germanium et le carbone sont classés dans le tableau périodique sur la colonne IV. Ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, Ils sont destinés par sans défaut de structure. Les semi-conducteurs ont une valence de IV : cela veut dire que la couche périphérique de leurs atomes contient 4

électrons. Au total, cette couche peut contenir 8 électrons, alors, 4 états de la couche sont vacants.

I.6.2 Les semi-conducteurs II-VI :

Les semi-conducteurs II-VI sont constitués par l'association d'un élément de la colonne II avec un élément de la colonne VI de la classification périodique de Mendeleïev. Les semi-conducteurs II-VI cristallisent dans la structure zinc blende et/ou wurtzite. Ces deux types de structure sont formes de l'empilement de plans d'anions et de cation successifs de maille hexagonale. Cette structure permet des liaisons SP_3 de symétrie tétraédrique caractéristiques des liaisons covalentes des semi-conducteurs. Les deux structures sont stables à température ambiante [9].

I.6.3 Les matériaux semi-conducteurs III-V :

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 dans leur réseau cristallin. En utilisant la microélectronique de ces matériaux pour des circuits fondus, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes [10].

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont issus de la composition d'un élément de la 3^{ème} colonne (bore, aluminium, gallium...) et la 5^{ème} colonne (azote, phosphore, ...) de la classification périodique de Mendeleïev. Les composés semi-conducteurs III-V peuvent également réaliser des alliages et des hétéros structurent divers types. Le contrôle de la bande passante interdit permet de travailler dans une plage plus large, la gamme de longueurs d'onde dépend de la composition de l'alliage ou du stratifié structure hétérogène. Par conséquent, les matériaux III-V ont un réel potentiel en optoélectronique. Ainsi, de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. La structure sphalérite organisé la plupart des matériaux, cette structure est similaire aux diamants, est se compose de deux sous-réseaux cubiques centrés sur le centre de la face. Et quelquefois s'organise dans la structure hexagonale [11]. L'aspect général des bandes de tous les composés III-V est le même, et ils ont tous presque des écarts directs.

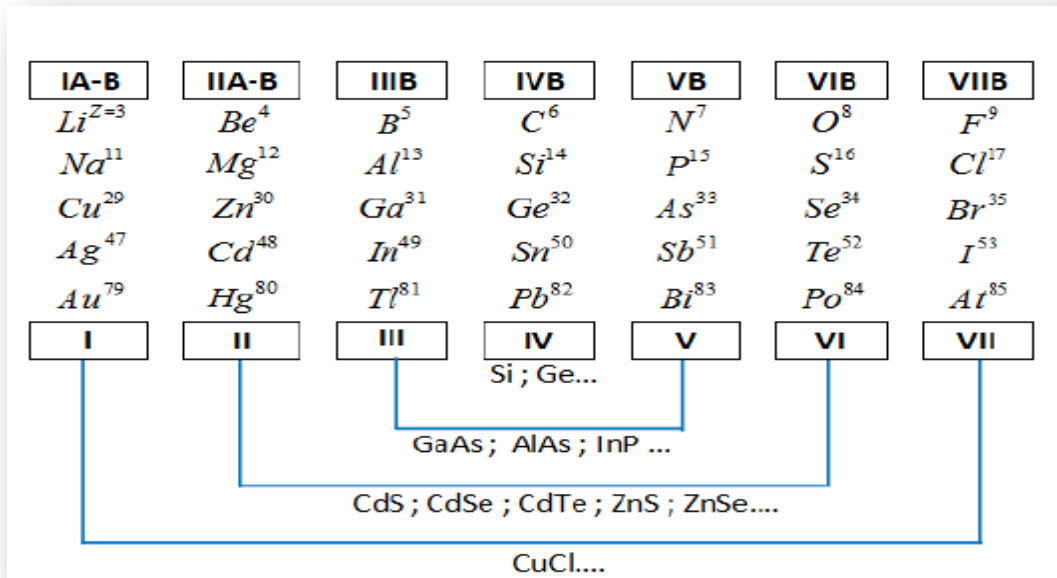


Figure I.5- Extrait du tableau périodique des éléments chimiques et composition en SC binaires suivant leurs groupes.

I.7 Les types de semi –conducteurs :

Un semi-conducteur peut être pur auquel cas il dit intrinsèque, soit dopé par impuretés (qui permettent de contrôler sa résistivité) auquel cas il dit extrinsèque [12].

I.7.1 Semi-conducteur intrinsèque ou pur :

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsque le cristal n'est pas pollué (volontairement ou non) par impuretés pouvant changer la conduction en porteurs libres. Et qui signifie qu'ils ont seulement un type d'élément ou un composé dans sa structure cristalline [13]. Un semi-conducteur pur est un matériau idéal ne possédant ni un défaut physique ni un défaut chimique, Il est caractérisé par les électrons de la bande de conduction ne peuvent provenir que des niveaux de la bande de valence autrefois occupés, laissant des trous derrière eux. Le nombre d'électrons de la bande de conduction est donc égal au nombre de trous dans la bande de valence [14]. Le niveau de Fermi intrinsèque E est localisé au voisinage du milieu de la bande Interdite.

I.7.2 Semi-conducteur extrinsèque ou dopé :

On dit semi-conducteur extrinsèque lorsque il y'aura une modification sur le semi-conducteur pur donc il y'a changement de nombre des porteurs libres soit (électrons ou trous), Cela implique d'augmenter la densité de ces porteurs, C'est l'augmentation est

obtenue le plus souvent en introduisant dans le matériau de manière intentionnelle une faible concentration d'impuretés de nature contrôlée. Cet ajout est appelé dopage [15]. Il a une influence considérable sur les propriétés des semi-conducteurs pour améliorer la capacité de transport de courant.

Le dopage est utilisé pour contrôler le nombre d'électrons ou de trous dans le matériau en ajoutant une certaine quantité d'impuretés, de matériaux de type p ou le type n correspond au nombre de trous ou d'électrons libres [14].

- **Semi-conducteur de type N:** Le dopage de type N consiste à augmenter la densité en électrons dans le semi-conducteur intrinsèque. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes riches en électrons dans le semi-conducteur. Dans ce type de semi-conducteur attribuée à électron à bande de conduction, que le transporteur principal, les trous qui dans une moindre mesure à la conductivité [15].
- **Semi-conducteur de type P:** Le dopage de type P consiste à augmenter la densité en trous dans le semi-conducteur intrinsèque. Pour ce faire, on inclut un certain nombre d'atomes pauvres en électrons dans le semi-conducteur pour créer un excès de trou [16]. Les matériaux de type P ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires [15].

I.8 Les propriétés structurelles de semi-conducteur :

I.8.1 Zones de Brillouin :

L'espace réciproque associé au cristal est partitionné en régions appelées : Zones de Brillouin. Il en existe une infinité. Elles peuvent être définies à l'aide des plans de Bragg qui sont les plans médiateurs de l'ensemble des vecteurs formés par des combinaisons linéaires des vecteurs du réseau réciproque. Les zones de Brillouin ont une importance particulière en physique des semi-conducteurs puis elles correspondent à leurs bandes d'énergies. La première zone de Brillouin est la cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque, c'est à dire qu'elle est formée de l'ensemble des points qui sont les plus proches d'un point G_0 du réseau réciproque (généralement $G_0 = (0, 0, 0)$).

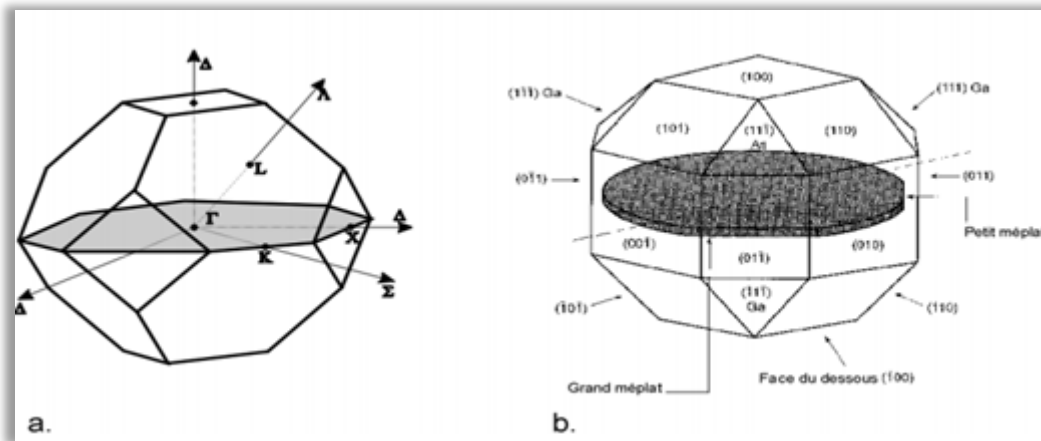


Figure I.6 - a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions Cristallographiques d'un substrat de GaP [17].

I.8.2 La structure zinc blende :

Dans les composés binaires semi-conducteurs généraux cristallisent dans un arrangement zinc-blende (Figure I.7 exemple pour sa forme) avec un environnement tétraédrique et une même hybridation sp^3 . La structure zinc-blende est une structure d'origine cubique appartenant au groupe spatial $F43m$ (Td). La structure sphalérite est une structure d'origine cubique appartenant au groupe spatial $F43m$ (Td). La maille élémentaire de cette structure est presque identique à celle du diamant à la seule différence, que chaque atome d'un élément donné est entouré par quatre atomes de l'autre groupe.

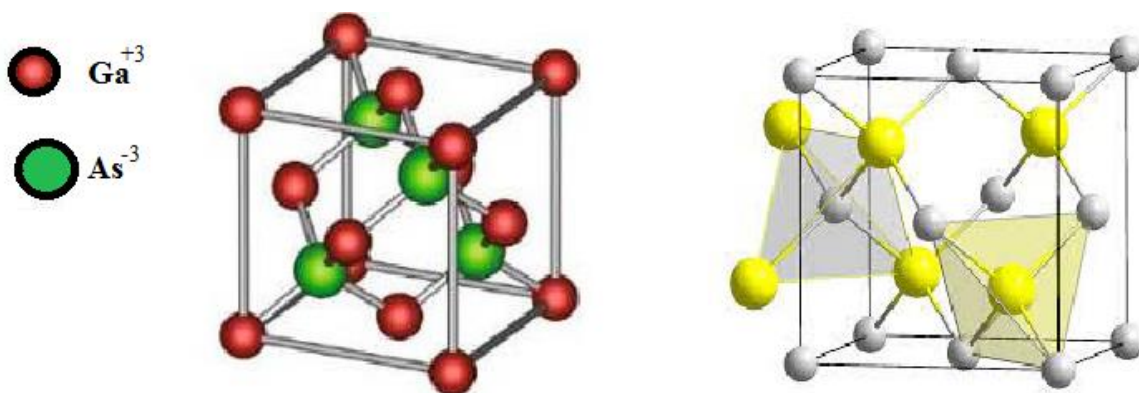


Figure I.7- Mailles élémentaires de la structure zinc blende.

I.8.3 La maille wurtzite :

La structure wurtzite est similaire à celle de zinc blende, les deux ont des coordonnées quadruples, Sauf que l'organisation a un réseau de Bravais hexagonal compact-fermé (hcp) plutôt qu'un cfc. En examinant la séquence d'empilement des plans de sphères denses fermées avec le même rayon le long de la direction (111).

Le réseau hexagonal répète chaque deux couche. Qu'il y a quatre atomes par unité de cellule dans un semi-conducteur wurtzite, parce que chaque unité de cellule hcp contient deux sites atomiques non-équivalents. Il doit être noté qu'un hcp idéal est un hexagone de hauteur c et de longueur de cotés a d'un rapport (c/a) de $(8/3)^{0.5} = 1.633$ (cas parfaits), tandis que la plupart des semi-conducteurs wurtzite ont une légère différence du rapport (c/a) . (La figure I.8) montre plus.

Contrairement à la structure zinc blende, qui requiert seulement un seul paramètre (la constante du réseau a) pour spécifier le cristal, la structure wurtzite requiert trois : la constante de réseau a , le rapport c/a , et le rapport γ entre la longueur de liaison dans la direction c et les trois autres longueurs (égales) de liaisons [18].

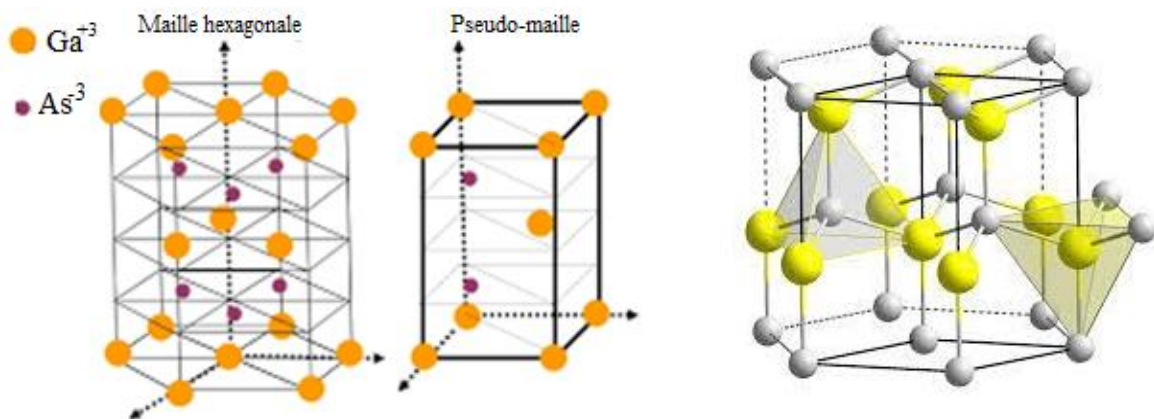


Figure I.8 - Mailles élémentaires de la structure wurtzite.

I.9 Définitions des matériaux étudiés :

I.9.1 L'arséniure de gallium (GaAs) :

Le monde des semi-conducteurs est un marché dominé par le silicium (Si). Mais certains candidats sont apparus récemment, y compris des matériaux III-V. Parmi ces matériaux III-V, le GaAs s'est avéré être l'un des matériaux les plus prometteurs en raison de ses propriétés optoélectroniques, physiques et thermiques très intéressantes. Ces matériaux ont ouvert un large éventail d'applications, comme dans les communications sans fil et comme composantes à plaques photovoltaïques ou amplificateur optique.

D'un autre côté l'arséniure de gallium est un composé chimique d'arsenic et de gallium. C'est un matériau semi-conducteur de la famille III-V [19], puisque le gallium et l'arsenic sont situés respectivement dans les colonnes III et V du tableau périodique des éléments et ont donc 3 et 5 électrons de valence et distingué à gap direct. C'est un composé binaire, peu sensible au rayonnement ionisant et à l'ultraviolet.

I.9.2 Structure cristalline :

Le GaAs s'organise sous forme cristalline dans la structure cubique zinc blende [20]. (La figure 1.9) illustre les deux formes de sa structure. L'arrangement cristallographique est lié aux conditions de croissance et à la nature du substrat. Dans la structure zinc blende, les atomes de gallium ($Z=31$) forment un empilement cubique faces centrées dans lequel occupent la moitié des sites tétraédriques et les atomes d'arsenic ($Z=33$) occupent quatre des huit sites tétraédriques de cette maille. Cette structure est caractérisée par le paramètre de maille « a » qui pourra être obtenu facilement sur des substrats tels que SiC, Si, l'oxyde de magnésium (MgO) et bien sûr le GaAs.

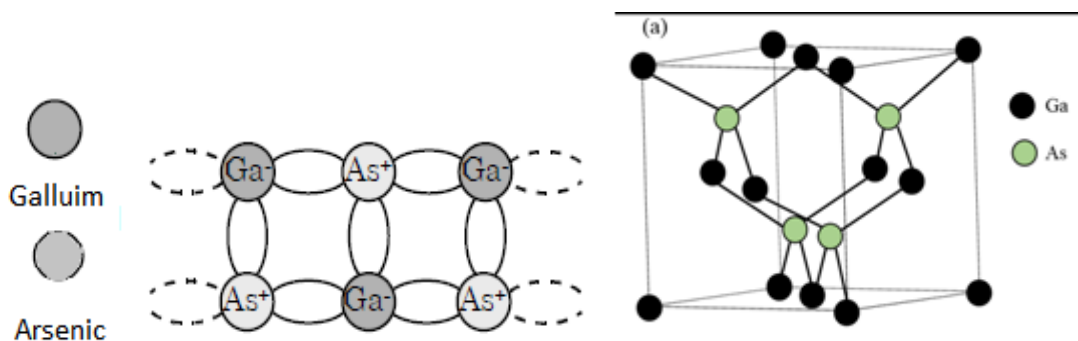


Figure I.9- Maille élémentaire de deux types de structures zinc blende du GaAs.

I.9.3 Quelques propriétés de GaAs :

En raison de la grande mobilité des porteurs de charge dans les composants à base des matériaux III-V, ils sont particulièrement adaptés aux applications hyperfréquences.

Le Nitrure de l'arséniure de gallium ne fait pas exception. Par conséquent, il est en concurrence avec le silicium, Autres chaînes III-V à base de substrats InP et GaN.

L'industrie des semi-conducteurs utilisent de plus en plus GaAs, à grande mobilité d'électrons, dans les microprocesseurs, les circuits intégrés, les puces Wifi, les microondes les cellules photovoltaïques, les dopants lasers, les transistors hyper-fréquence, etc.

- Ils peuvent également fonctionner à une puissance plus élevée en raison d'une tension de claquage plus grande.
- Il a une vitesse de saturation des électrons plus élevée et une mobilité plus élevée, Ce qui peut être utilisé pour travailler à des fréquences supérieures à 250 GHz.

Un autre avantage de l'arséniure de gallium est son gap direct ce qui lui permet d'émettre de la lumière. Les propriétés de l'arséniure de gallium, notamment sa vitesse de commutation, en font un matériau idéal pour les applications informatiques. Dans les années 1980, de nombreuses personnes pensaient que le marché de la microélectronique serait à terme dominé par l'arséniure de gallium, remplaçant le silicium. Les fournisseurs de supercalculateurs Cray Research, Convex et Alliant ont fait la première évolution. Cray a développé la machine à arséniure de gallium Cray³.

Tableau I.1 : Quelques propriétés physiques de l'arséniure de gallium [21].

Nom	Unités Valeurs
Structure cristalline	Zinc blende
La configuration électronique	$3d^{10} 4s^2 4p^3$.
Paramètre cristallin	5.63 a (Å°)
Masse molaire	144.63 M (g/mole)
Masse volumique	5.32 ρ (g/cm ³)
Nombre atomes par unité de volume	$4.4 \cdot 10^{22}$ N (cm ⁻³)
Énergie de gap	1.42 Eg (eV)
Mobilité des électrons	$8.5 \cdot 10^3$ (cm ² /V.s)
Mobilité trous	400(cm ² /V.s)

I.10 Le chrome :

I.10 .1 Introduction :

Le chrome a été découvert par le chimiste français Nicolas Louis Vauquelin en 1797. Le métal est ainsi nommé car il donne des couleurs vives. Son composé (khrôma en grec signifie couleur). Ces premières utilisations pour l'élaboration de pigments apparurent vers l'année 1800 en France, Allemagne et Angleterre [22].

Le chrome (Cr) est un métal qui existe dans différents états d'oxydation, Il peut être considéré comme l'élément le plus utilisé après le manganèse. Il a été fusionné dans semi-conducteur IV, II-VI et III-V. on peut se référer aux travaux de Choi et al [23]. Ils ont développé le Cr dopé (1%) et la température de Curie rapportée est d'environ 125K.

Le métal Cr [Cr (0)] ne se trouve pas naturellement dans l'environnement, mais d'origine humaine. Le composé trivalent [Cr (III)] est très stable et existe naturellement dans le minerai, Pour le cas du Cr hexavalent [Cr(VI)] est un peu stable à comparaison de [Cr (III)], rarement trouvé naturellement dans l'environnement, sauf dans les roches crocodiles, il est généralement causé par des sources artificielles [24]. Le (Cr) a maintenant trouvé un grand nombre d'applications une industrie qui utilise ses couleurs mais qui a aussi beaucoup d'autres couleurs solidité, dureté et résistance à la corrosion. Il n'est pas compte tenu de sa qualité, il est surprenant qu'une grande quantité de chrome soit utilisé dans différents processus industriels, donc très grand quantité de déchets de chromage est générée, qui est finalement rejetée vers alentours.

I.10.2 Domaines d'utilisation du chrome :

Sur une échelle mondiale, 80% du chrome est utilisé pour extraire les applications, y compris, Dans les traitements métalliques contre la corrosion et autres attaques oxydantes depuis la fin du dix-neuvième siècle [25]. Environ de 15% est employé dans la fabrication des produits chimiques et le reste est utilisé dans les applications réfractaires [26].

Dans l'industrie chimique, Cet élément est également utilisé dans les industries chimiques où il sert de catalyseur dans les synthèses organiques [27], par exemple en en tannerie, et dans la peinture et la teinture, les explosifs, la céramique, le traitement du bois ainsi que par l'industrie papetière.

Le chrome est utilisé dans l'industrie métallurgique pour la production des alliages de fer-chrome comme l'acier inoxydable, l'acier rapide, les alliages de fonte et non ferreux [28].

Le chrome fut principalement utilisé comme pigment dans la peinture. Avant le siècle dernier mais ces temps-ci on l'utilise principalement (à 85%) dans les alliages de métaux (et évite ainsi leur corrosion), le tannage du cuir, la teinture de tissus, les matériaux d'enregistrement audio et vidéo (oxyde de chrome).

Le chrome est inclus dans plusieurs de ses utilisations dans notre vie quotidienne. On le voit (Cr) en savons, détergents et cosmétiques, spray, les lessives, les produits de nettoyage des métaux, et les piles sèches,

I.10.3 Toxicité :

Le chrome présente une toxicité très élevée qui dépend non seulement de sa concentration mais aussi de son degré d'oxydation. Le chrome hexavalent est très soluble dans l'eau. Cette solubilité lui confère une grande mobilité dans les écosystèmes.

En effet, le chrome (VI) attire plus l'attention en raison de sa toxicité 300 fois élevée que le chrome (III) [29]. Les manifestations toxiques du chrome sont attribuées à la forme hexavalent qui provoque diverses conséquences sur la santé, même à de faibles concentrations. Les principales nuisances provoquées par le chrome hexavalent sont les phénomènes allergiques, les éruptions cutanées, les ulcères d'estomac et les effets cancérigènes [30].

I.10.4 Propriétés physico-chimique de chrome :

I.10.4.1 Propriétés chimiques :

Le chrome est un élément chimique, métallique, d'une couleur gris acier-argenté, de numéro atomique 24. Il résiste à la corrosion et au ternissement, sa masse atomique est de 51,996 g/mol, de densité 7,14, son point de fusion est de 1840 °C et son point d'ébullition est de 2642 °C. Il appartient aux éléments de transition de la première série (groupe (VI) b), il existe sous plusieurs états d'oxydation ; du Cr (0) de forme métallique jusqu'à Cr (VI) de forme anionique. Il est obtenu à partir du minerai par transformations successives en chromate.

I.10.4.2 Propriétés physiques :

Et d'autre coté on à quelque les propriétés physiques de cet élément sont regroupées dans le tableau I.2 :

Tableau I.2 : Propriétés physiques du chrome [25].

État ordinaire	Solide
Rayon de covalence	1,39 ± 0,05 Å
Configuration électronique	[Ar] 3d ⁵ 4S ¹
Électrons par niveau d'énergie	2, 8, 13, 1
Oxyde	Acide
Point de fusion	1 875 °C
Point d'ébullition	2 671 °C
Énergie de fusion	16,9 kJ mol ⁻¹
Volume molaire	7,23×10 ⁻⁶ m ³ mol ⁻¹
Pression de vapeur	990 Pa à 1 856,85 °C
Énergie de vaporisation	344,3 kJ mol ⁻¹

I.11 La spintronique et semi-conducteurs magnétiques dilués :

I.11.1 Introduction à la spintronique :

La spintronique ou électronique de spin propose d'utiliser non seulement la charge mais aussi le spin de l'électron pour coder l'information. Le spin qui était totalement négligé jusqu'alors dans les applications de la microélectronique classique, donne lieu à des phénomènes physiques nouveaux qui offrent des perspectives intéressantes en matière d'intégrabilité, de vitesse de commutation, de consommation et de non-volatilité de l'information. C'est en ce sens que la spintronique a suscité un vif intérêt dans la communauté scientifique comme alternative au l'électronique classique qui est aujourd'hui confrontée au des obstat les physiques majeurs dus au une réduction accrue de la taille des composants.

La spintronique a déjà connu de nombreux succès et de les exploiter dans des composants innovants pour sa ce domaine s'est beaucoup développé au cours des 20 dernières années grâce à une très forte synergie entre recherche amont et développements

applicatifs après la découverte de la Magnétorésistance Géante (GMR) en 1988 il était une très grande percée dans le domaine la spintronique . La GMR particulièrement dépendant sur circulation le courant dans l'ensemble formé par une couche métallique prise entre deux couches magnétiques dont on renverse l'aimantation relative. Par la suite, le domaine de la spintronique a montré une expansion continue où plusieurs autres effets, tels que la magnétorésistance tunnel (TMR). On obtient la TMR lorsque le courant circule perpendiculairement entre deux couches magnétiques séparées par une barrière isolante.

Dans les deux cas, les propriétés de l'interface sont évidemment essentielles. La spintronique a ainsi participé pleinement à la miniaturisation accrue de l'électronique. Celle-ci utilise désormais des composants de dimensions nanométriques à la fois pour traiter (dans des composants à base de silicium) et stocker (dans des structures magnétiques avec une lecture utilisant la GMR ou la TMR) plus rapidement une quantité accrue d'information, avec un coût en énergie moindre.

I.11.2 Définition de spin :

Il est impossible expliquer la propriété méningitique d'un corps ferromagnétique sans faire appel de spin, afin interpréter les resautât expérimentaux, il est nécessaire d'admettre que le électron est une particule de spin ($s=1/2$), c'est-à-dire un moment cinétique intrinsèque.

Une particule subatomique comme l'électron est doté un moment cinétique intrinsèque, appeler le spin tout se passe en effet comme si la particule tournait autour d'elle-même comme une toupie [31].

I.11.3 Les matériaux ferromagnétiques :

Un matériau magnétique est caractérisé par la présence de moment magnétique. L'existence de ce moment est due au mouvement des électrons, dits de valence, dans les atomes. Ce sont de grandeurs vectorielles, qui ont donc une direction et qui ont pour unité des $A\ m^2$. Un métal ferromagnétique comme le fer ou le cobalt, par exemple, est caractérisé par un décalage des bandes d'énergie des électrons des 2 directions de spin, comme illustré par (la figure I.10). Il en résulte que les électrons de spin majoritaire (spin \uparrow) et ceux de spin minoritaire (spin \downarrow) conduisent le courant en parallèle avec des conductivités différentes ; c'est la base générale des effets de l'électronique de spin.

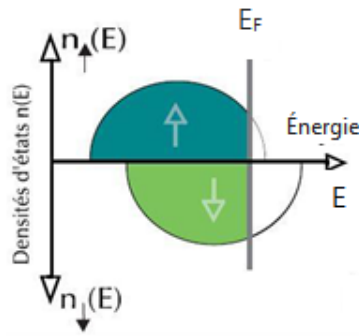


Figure I.10- Densité d'états en fonction de l'énergie pour les bandes de conduction (dans un métal ferromagnétique).

On distingue la bande spin \uparrow (up) et spin \downarrow (down) décalées en énergie par les interactions dites d'échange (l'aimantation spontanée d'un métal ferromagnétique est associée à ce décalage). Il en résulte que les fonctions d'onde des électrons au niveau de Fermi E_F qui déterminent les propriétés de transport sont différentes pour les deux directions de spin, ce qui est à l'origine de la dépendance en spin de la conduction et MGR [32].

Dans le cas des corps ferromagnétiques, il existe une aimantation naturelle, sans besoin d'appliquer un champ magnétique extérieur sur le matériau: c'est l'aimantation spontanée. Cette aimantation existe grâce à l'alignement des moments magnétiques dans le matériau.

Les matériaux ferromagnétiques se partagent en petits domaines à l'intérieur desquels tous les atomes ont une aimantation parallèle. Ces domaines tendent à s'aligner dans la direction d'un champ magnétique extérieur, ce qui confère au matériau une forte aimantation si le cas des matériaux fer le nickel et le cobalt sont constitués d'éléments métalliques qui leur permettent de prendre une forte aimantation. L'utilisation de matériaux ferromagnétiques est magnétique, car en raison du phénomène d'hystérésis, ils peuvent non seulement être fortement magnétisés, mais également rester magnétiques.

I.11.4 La magnétorésistance géante (GMR) :

La découverte majeure qui est à l'origine de l'engouement pour la spintronique est la magnétorésistance géante. Découverte à la fin des années 80 par Albert Fert [33] et Peter Grünberg [34]. Dans ils ont étudié respectivement Fe / Cr / Fe dans le super-réseau et les trois couches ils ont observé la résistivité du courant d'une couche à l'autre cela dépend de

la disposition relative de l'aimantation de chaque couche de Fe. La magnétorésistance géant est représentée dans la structure multicouche alternée matériaux ferromagnétiques et matériaux non magnétiques (Figure I.11). En dessous de sous l'action d'un champ magnétique externe, la résistance l'ensemble est considérablement réduit.

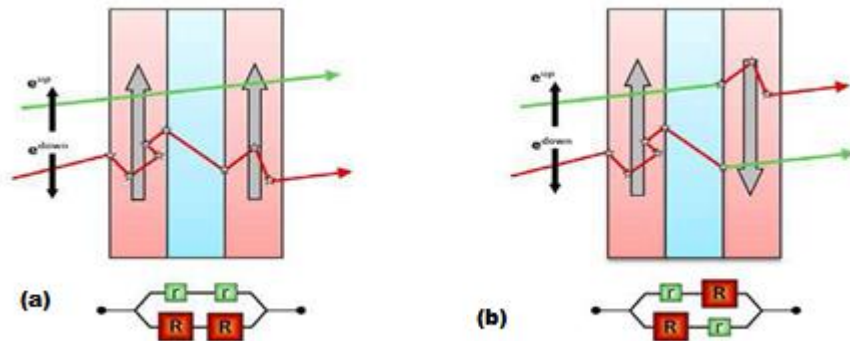


Figure I.11- Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante.

(a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.

La magnétorésistance géante (GMR) utilise le fait que le transport des électrons dans un matériau ferromagnétique dépend du spin des électrons. Il s'agit dans les métaux, le courant électrique est en général décrit comme un déplacement de charges négatives sans influence de leur spin. Le comportement de la résistivité avec la température doit suivre la loi de Matthiessen [35]. C'est Sir Nevill F. Mott qui en 1936 va le premier mettre en évidence un comportement différent de la résistivité des métaux ferromagnétiques en dessous de la température de Curie [36]. Expérimentalement il remarque que pour des températures inférieures à T_C , la résistivité obtenue expérimentalement est inférieure à celle calculée sans tenir compte de l'aimantation du matériau. Il propose alors un modèle de transport à deux canaux (Figure I.12). Ce modèle sera développé un peu plus tard par A. Fert et I.A. Campbell dans une étude consacrée à la conduction à deux courants dans le nickel [37]. Les électrons dont le spin est orienté suivant l'aimantation locale (électrons majoritaires) et ceux dont le spin est opposé à la direction de l'aimantation locale (électrons minoritaires).

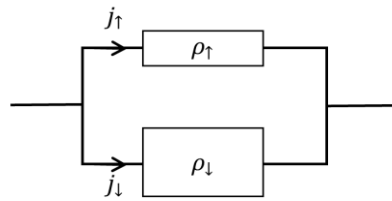


Figure I.12 – Modèle de Mott à deux canaux.

Dans le cas d'absence de champ magnétique extérieur, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques successives sont opposés et la résistance est maximale alors qu'en présence d'un champ magnétique, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques alignent progressivement dans l'axe du champ magnétique appliqué et la résistance électrique de la structure diminue.

I.11.5 La magnétorésistance tunnel (TMR) :

Au milieu des années 90, le séparateur métallique entre les deux couches ferromagnétiques a été remplacé par une couche isolante dans des structures appelées jonctions tunnel magnétiques.

L'effet tunnel pour un courant polarisé a été décrit en 1989 par Slonczewski [38]. On considère un empilement magnétique composé d'une couche d'oxyde, entre deux couches métalliques ferromagnétiques, FM1 et FM2. On suppose que l'information de spin est conservée par les électrons lorsqu'ils franchissent la barrière tunnel et que leur probabilité de franchir cette barrière est proportionnelle aux densités d'états au niveau de Fermi des électrodes FM1 et FM2.

Cet effet avait été observé pour la première fois par le Français, Michel Jullière, en 1975 [39], à basse température dans des jonctions magnétiques semi-conductrices à base de germanium. La magnétorésistance tunnel (TMR) est alors définie par le rapport des résistances dans l'état parallèle (R_P) et antiparallèle (R_{AP}) des aimantations suivant le modèle phénoménologique de Juliers [40]. La TMR peut être reliée à la polarisation en spin des deux électrodes ferromagnétiques par la relation :

$$TMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} = \frac{2P_1P_2}{1 - P_1P_2} \quad (I.5)$$

P_1 et P_2 sont les polarisations de l'électrode 1 et 2.

Les TMR sont aujourd'hui présentes dans une très grande partie des dispositifs spintronique. Elles constituent la brique de base des mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM) qui font l'objet de recherches intenses et sont un des candidats sérieux pour l'introduction de non volatilité au plus près des processeurs. Ainsi, plus l'écart de résistance entre les deux états, parallèle et antiparallèle, est important, plus le courant de lecture nécessaire à la lecture.

I.11.5.1 Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM) :

La Mémoire Magnétique à Accès Aléatoires (MRAM) a connu un intérêt grandissant car elle offre des caractéristiques intéressantes alliant la rapidité, la résistibilité et la non-volatilité de l'information même en l'absence de tension d'alimentation. En effet, les MRAM permettraient de remplacer les mémoires DRAM dans la mémoire vive des ordinateurs actuels avec des temps d'accès beaucoup plus faibles. Contrairement aux mémoires DRAM, l'information dans les MRAM n'est plus stockée sous forme de charges électriques mais sous forme de moments magnétiques grâce à la technologie des jonctions magné tunnels. Ce type de mémoire non-volatile n'a pas besoin d'un rafraichissement constant des données et consommera donc beaucoup moins d'énergie que les mémoires DRAM actuelles : un atout décisif pour accroître l'autonomie de toutes les applications électroniques nomades, les ordinateurs portables par exemple.

L'idée de départ ce dispositif était basée sur une architecture matricielle ou « cross point » du même type que celle de la Magnetic Core Memory, mais en remplaçant les ferrites par des jonctions tunnels magnétiques. Les états parallèle et antiparallèle des aimantations de la couche libre par rapport à la couche de référence définissent deux états de résistances qui correspondent aux niveaux '0' et '1' de la cellule mémoire (ou bit). Chaque bit est adressé individuellement par une ligne de mot et une ligne de bit (bit line). (La Figure I.13) représente une vue schématique de cette matrice mémoire.

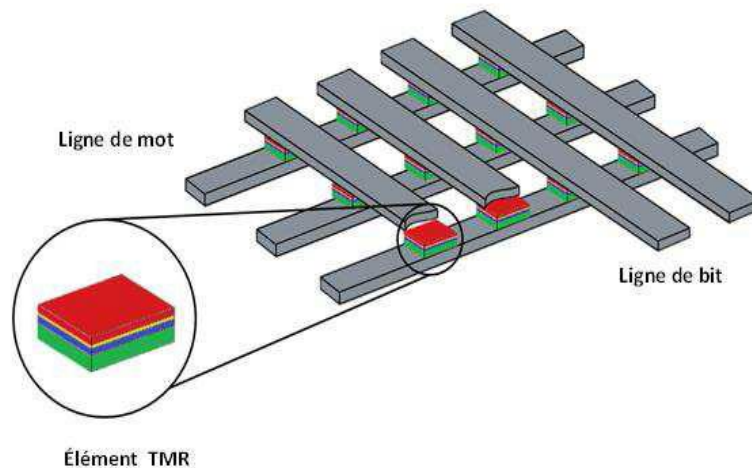


Figure I.13 - architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonctions tunnels magnétiques [41].

Le principe de la lecture d'un bit est de faire circuler un courant entre une ligne de mot et une ligne de bit. La mesure de la résistance ainsi obtenue correspond à l'état de résistance faible ou fort. Cependant, en appliquant une tension entre deux lignes, un ensemble de chemins possibles pour le courant traversant une ou plusieurs jonctions tunnel magnétiques se superposent. Pour éviter ce problème de lecture, un transistor en série a été ajouté avec chaque cellule pour pouvoir les adresser chacune individuellement lors de la lecture.

I.12 Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) :

I.12.1 Introduction :

La spintronique se trouve à l'intersection de l'électronique conventionnelle et du magnétisme en cela qu'elle consiste à manipuler conjointement des charges et le spin des porteurs de charge. Par conséquent, des matériaux semi-conducteurs magnétiques apparaissent comme les matériaux de choix de cette nouvelle discipline. En effet, les propriétés électroniques dans un matériau semi conducteur peuvent être modifiées par le dopage, mais aussi par l'application d'un champ électrique ou d'une impulsion lumineuse.

D'autre part, les matériaux magnétiques vont voir leurs propriétés magnétiques (liées au spin des électrons). Un matériau qui serait ferromagnétique et semi-conducteur, devrait donc permettre la manipulation indépendante ou conjointe des spins et des courants

de charges (suivant que les porteurs sont responsables ou non du couplage magnétique). Donc pour réaliser des semi-conducteurs magnétiques, l'idée de base est d'introduire des éléments magnétiques dans une matrice semi-conductrice.

I.12.2 Définition de DMS :

Ce semi-conducteur devient un semi-conducteur magnétique dilué lorsqu'on y introduit une impureté magnétique comme le manganèse (Mn), qui porte un spin et donc un moment magnétique. Ce sont les porteurs de charges du semi-conducteur qui assurent le couplage ferromagnétique entre les moments magnétiques localisés sur les impuretés [42]. C'est un mécanisme qui existe dans les métaux magnétiques ; mais les densités de charges et les densités de moments magnétiques dans les semi-conducteurs magnétiques dilués sont beaucoup plus faibles et les températures critiques obtenues jusqu'à maintenant sont bien inférieures à la température ambiante.

Il existe plusieurs familles des semi-conducteurs magnétiques dilués, il y a des DMS à base des semi-conducteurs IV et IV-VI, ces derniers font l'objet de peu d'études et elles ne sont pas compatibles avec ceux constituant l'électronique moderne, car leurs structures cristallographiques sont trop différentes. Il y a aussi les DMS à base des semi-conducteurs III-V et II-VI. Ces derniers font l'objet de plusieurs études ces dernières décennies, notamment ceux qui sont dopés Mn. Les deux raisons importantes de ce choix sont que l'ion Mn^{2+} possède un grand moment magnétique ($S = 5/2$), caractéristique d'une couche d à moitié pleine ; et qu'il est possible de l'incorporer en grande quantité dans la matrice hôte sans affecter la qualité cristallographique du matériau final [43].

I.12.3 Injection à l'interface métal ferromagnétique semi-conducteur :

L'injection de courant spin-polarisé dans un semi-conducteur est une étape nécessaire au développement de la spintronique, Schmitt et al [44] ont étudié de courant polarisée en spin dans les structures métalliques ferromagnétique / canal dans SC / métal ferromagnétique, le canal forme un gaz d'électrons libres bi-dimensionnel. Ils montrent qu'il existe un décalage de conductivité entre les semi-conducteurs et métal ferromagnétique. Ce dernier est l'obstacle fondamental à est injecté dans le taux d'implantation de cette structure est relativement faible à est de 0,1%. Un matériau magnétique de conductivité proche de celle du semi-conducteur serait donc une solution, comme les semi-conducteurs magnétiques dilués.

I.12.4 Classification de semi-conducteurs magnétiques dilués :

On peut distinguer deux grandes familles de semi-conducteurs magnétiques :

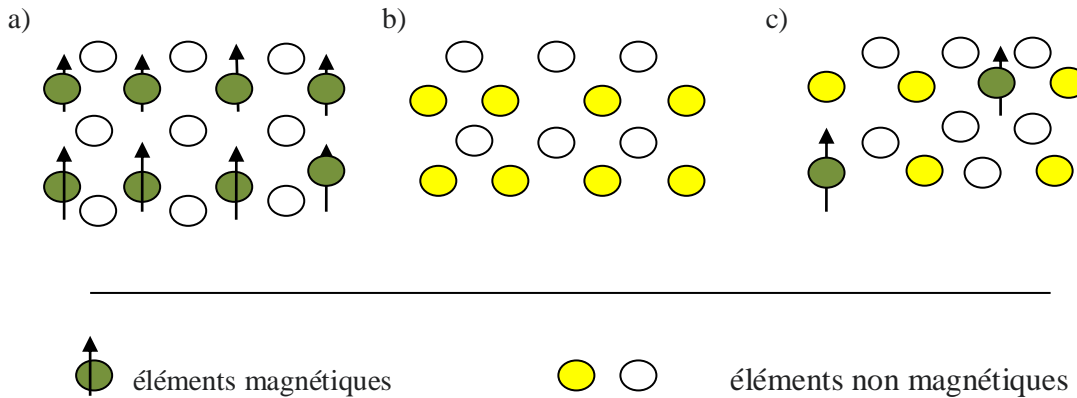


Figure I.14- (a) Semi-conducteurs où les éléments magnétiques forment un réseau périodique.

(b) Semi-conducteurs traditionnels sans éléments magnétiques

(c) Semi-conducteurs magnétiques dilués où les éléments magnétiques sont répartis d'une manière aléatoire.

- La première est constituée de matériaux semi-conducteurs dans lesquels on introduit en grande quantité des éléments magnétiques (métaux de transitions ou terres rares) de sorte que les atomes magnétiques s'ordonnent sur un réseau périodique formant avec les atomes de la matrice un réseau cristallin défini (Figure I.14(a)) et donc une phase parfaitement définie. Ces matériaux sont parfois appelés CMS pour (Concentrated Magnetic Semi-conductors). Les principaux représentants de cette famille sont des halogénures de chrome (CdCr_2Se_4 , CuCr_2S_4) ou d'euporium (EuS , EuSe) et certains manganites. la difficulté à les intégrer dans les filières existantes de la microélectronique (Si , GaAs) rend leur intérêt limité. C'est pour cette raison que l'approche consistant à utiliser des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) semble plus prometteuse.
- L'approche DMS est sensiblement différente de la précédente. ici, on va encore introduire des ions magnétiques (principalement métaux de transition) dans une matrice semi-conductrice, mais dans des quantités savamment faibles pour ne pas modifier la structure cristalline de la matrice (figure I.14 (c)). Pour cela, on va travailler avec des concentrations de quelques dixièmes à quelques pourcents en général.

Les semi-conducteurs magnétiques basés sur les éléments IV ont été dans un premier temps complètement négligés au profit des II-VI et III.V. En effet, ces derniers, matériaux semi-conducteurs à gap direct, rendent possible la manipulation et la détection optique du spin des porteurs de charge. Cependant, bien que le silicium et le germanium ne soient pas a priori les matériaux les mieux adaptés pour l'optique, ils restent incontestablement et particulièrement le silicium, les matériaux principaux de la microélectronique actuelle.

Dans un premier temps, les travaux sur les DMS se sont focalisés sur le dopage par des ions magnétiques des semi-conducteurs II-VI [45]. En effet, dans ces matériaux, les atomes magnétiques présentent la même valence que les cations de la matrice (Cd ou Zn en général) ce qui permet de les incorporer facilement en substitution de ces cations, sans modification des propriétés électriques. Ainsi, des calculs ont annoncé des solubilités de 86% et 77% du Mn dans les composés $Zn_{1-x}Mn_xTe$ et $Cd_{1-x}Mn_xTe$ respectivement [46]. De plus, l'intérêt des métaux de transitions dans les II-VI réside aussi dans le fait qu'ils introduisent des spins, sans introduire de charges libres dans le matériau. Le dopage des II-VI au Mn, par exemple, introduit aléatoirement des spins localisés $S = 5/2$ dans la matrice sans modifier la densité des porteurs. Pourtant, parmi les semi-conducteurs II-VI, le $Zn_{1-x}Cr_xTe$ est le seul matériau dans lequel a été démontré un ferromagnétisme à température ambiante [47] et ces résultats sont aujourd'hui discutés dans la mesure où ils ne sont pas la conséquence de la dilution du Cr, mais plutôt de sa précipitation [48]. Ainsi, les très faibles températures de Curie annoncées jusqu'à aujourd'hui dans les II-VI réellement dilués n'en font pas de très bons candidats pour des applications futures.

Dans la synthèse de semi-conducteurs III-V magnétiques, la faible solubilité des éléments magnétiques a tendance à entraîner la formation de précipités métalliques. En particulier, dans GaMnAs, un problème récurrent est la formation de précipités de MnAs, alliage stable, ferromagnétique dont la température de Curie est proche de l'ambiante [49]. Pour éviter ces problèmes de recristallisation, il est nécessaire de faire appel à des méthodes de croissance hors équilibre. La solution technique généralement adoptée est l'utilisation de l'épitaxie par jets moléculaires (MBE : Molecular Beam Epitaxy) à basse température. Ainsi, des couches de GaMnAs, mais aussi InMnAs, GaMnN, AlCrN ont

peut-être synthétisées avec des dopages conséquents en ions magnétiques (plusieurs pourcents), et des comportements ferromagnétiques. Dans la plupart des III-V, les températures de Curie obtenues sans dépasser la température ambiante sont bien supérieures aux températures de mise en ordre mesurées dans les II-VI. Cela tient notamment au fait que la structure de bande dans les arséniures est plus favorable que dans les tellurures à dopage et concentration d'ions magnétiques équivalents.

Aujourd'hui, il apparaît que la classification DMS ne peut décrire tous les semi-conducteurs magnétiques. En effet, on observe dans de nombreux cas, même en régime dilué, des phénomènes de ségrégation des ions magnétiques conduisant à la formation de précipités cohérents ou non avec la matrice semi-conductrice. Cette séparation de phase peut conduire à l'apparition de ferromagnétisme, mais on ne peut plus strictement parler de DMS.

I.12.5 Température de Curie :

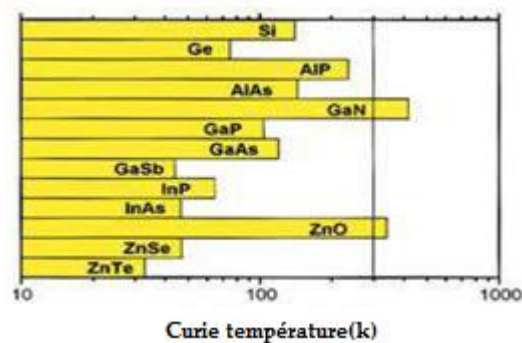


Figure I.15 - Prédiction théorique des températures de Curie pour certains semi-conducteur [50].

La température de Curie est une température critique caractérisant les matériaux ferromagnétiques. Au-delà de cette température, l'interaction d'échange n'est pas suffisante pour maintenir alignés les moments magnétiques entre eux, et le matériau se comporte alors comme un corps paramagnétique.

I.12.6 Les avantages des DMS à base de semi-conducteurs III-V :

Ces matériaux sont très utiles dans la recherche de l'électronique rotative, Ils présentent certains avantages inhérents: longue durée de vie (jusqu'à 100 ns) Porteur polarisé, lui permettant de transmettre des centaines de nanomètres; fort efficacité de la polarisation et de l'injection de spin; la position du porteur de dans puits quantiques ou hétéro structures en points quantiques. Ajouté à cela band engineering ouvre toutes les possibilités pour ces matériaux: espace, paramètres de grille et contraintes (au besoin).

Ces matériaux ont également des propriétés magnétiques intéressantes:

- Il y a une phase ferromagnétique au-dessus de la température ambiante.
- L'importance de leur facteur Lande, qui quantifie le couplage entre les attributs l'importance de leur facteur de Lande, qui quantifie le couplage entre les propriétés de spin et le champ magnétique extérieur, assurant un splitting Zeeman conséquent. Les propriétés dépendantes du spin, telles l'effet Faraday sont ainsi amplifiés et un champ magnétique assez faible peut suffire pour polariser totalement les porteurs au niveau de Fermi.

Références :

- [1] Vermeil, C., Matheson, M., Leach, S., & Muller, F. (1964). Photo-conductivité électrique et photo-ionisation dans les diélectriques liquides. *Journal de ChimiePhysique*, 61, 596-606.
- [2] Menguy, C. (1997). *Mesure des caractéristiques des matériaux isolants solides*. Ed. Techniques Ingénieur.
- [3] Keyrouz, M. B. (2011). *Etude des matériaux isolants d'encapsulation pour la montée En température des modules de puissance haute tension (Doctoral dissertation)*.
- [4] Khandelwal, M., &Mench, M. M. (2006). Direct measurement of throughplane thermal conductivity and contact resistance in fuel cell materials.*Journal of Power Sources*,161(2), 1106-1115.
- [5] Chen, F., Mohideen, U., Klimchitskaya, G. L., &Mostepanenko, V. M.(2006). Experimental test for the conductivity properties from the Casimir.
- [6] G.MARTEL, documentation I.D.I.L, l'Université de Rouen, (2003).
- [7] force between metal and semiconductor. *Physical Review A*, 74(2), 022103.
- [8] H.Mathieu,H.Fanet «Physique des semi-conducteurs et de composants électroniques»,Ed Dunod, Paris, (2009).
- [9] P.Baranski, V.Klotchkov, I.Potykeritch, « électronique des semi-conducteurs », Ed.Mir Moscow (1978).
- [10] K.S.A. Butcher et T.L. Tansley, *Superlattices and Microstructures* 38, 1 (2005).
- [11] J.Bolinsson, Philippe Caroff, Bernhard Mandl, Kimberly A Dick, « Wurtzite– Zinc blende superlattices in InAs nanowires using a supply interruption Method », *Nanotechnology*, vol. 22, no 26, (2011).
- [12] COCHRANE, C., KONCAR, V., LEWANDOWSKI, M., BELLONCLE, J, & DUFOUR, C. (2006). Influence des conditions climatiques sur les capteurs textiles à base de matériau conducteur nano composite.
- [13] S. Daniel, *Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using silvaco atlas*”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2012.
- [14] J. Lavery, *Quantum tunneling model of a P-N junction in silvaco*”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2008.

- [15] M. AMARA, Propriétés Electroniques des Conducteurs et des Semi-conducteurs rappel théoriques Plate-forme Matière Condensée et Cristallographie (MCC) C.E.S.I.R.E. Université J.Fourier Grenoble.
- [16] Nguyen, N., Studer, F., & Raveau, B. (1983). Oxydes ternaires de cuivre a valence mixte de type K_2NiF_4 deficitaires en oxygene: Evolution progressive d'un etat semi conducteur vers un etat semi-metallique des oxydes $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-x/2+\delta}$. *Journal of and chemistry of solids*, 44(5), 389-400.
- [17] J.Zimmermann, these de doctorat d'état << Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnai et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques>>, université de l.île 1, (1980).
- [18] A.Benyoucef « Contribution à l'Etude des Performances de Matériaux Photo-Voltaïques à base de Couches d'alliages $Si_{1-x}Ge_x$ et $Si_{1-x-y}Ge_xCy$ », thèse magister ,2004.
- [19] J. S. Blakemore, *J. Appl. Phys.* 53 R123 (1982).
- [20] R. Willardson, K. Beer, *Semiconductors and semimetals*, Academic Press. NeYork.Peterson, R. L. (1975).
- [21] M. Naguami, K. Nagaska, E. Kato, *J.Am, Ceram.Soc*, 73 [7], (1990).
- [22] S. Tunali et T. Akar. Zn(II) Biosorption Properties of *Botrytis cinerea* Biomass. *Journal of Hazardous Materials*, 2006, Vol. 131, N° 1-3, p. 137 – 145.
- [23] S. Choi, S.C. Hong, S. Cho, Y. Kim, J. B. Ketterson, C.-U. Jung, K. Rhie, B.-J. Kim, and. C. Kim, *Appl. Phys. Lett*, **81**, p. 3606,(2002). "**Ferromagnetism in Cr-doped Ge**".
- [24] Lahmar, H., Kebir, M., Nasrallah, N., & Trari, M. (2012). Photocatalytic reduction of C(VI) on the new hetero-system $CuCr_2O_4/ZnO$. *Journal of Molecular CatalysisA: Chemical*, 353, 74-79.
- [25] Y. Yu, Y.Y. Zhuang et Z.H. Wang. Adsorption of water-soluble dye ont Functionalized resin. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2001, Vol. 242, p. 288-293.
- [26] Barnhart, J. (1997). Occurrences, uses, and properties of chromiu *Regulatory toxicology and pharmacology*, 26(1), S3-S7.
- [27] S.P. Dubey et K. Gopal. Applicaton of Natural Adsorbent from Silver Impregnated

- Arachis Hypogaea Based Thereon in the Processes of Hexavalent Chromium for the Purification of Water. *Journal of Hazardous Materials*, 2009, Vol. 164, N°2-3, p. 968 – 975.
- [28] Aziri, S. (2018). Utilisation des déchets agro-industriels pour l'élimination du chrome hexavalent en solution aqueuse (Doctoral dissertation, Université Mouloud.
- [29] C.Lin, W.Luo, T.Luo, Q.Zhou, H.Li, L.Jing, A study on adsorption of Cr (VI) by modified rice straw: characteristics, characteristics, performances and Mechanism *Journal of cleaner production*, 2018, 196, 626-634.
- [30] D.Amer, B.Boucherguine, Mémoire de Master : Etude physico-chimique de l'adsorption du chrome hexavalent sur la bentonite activée Université Bejaia, 2017.
- [31] Le magazine d'information de l'université paris sud .Albert Fert.Pris Nobel de phy 2007
- [32] Baibich, M. N. *et al.* Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. *Physical Review Letters* **61**, 2472–2475 (1988).
- [33] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant magnetor (001)Fe/(001) Cr résistance of magnetic superlattices. *Physical Review Letters*.
- [34] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnet Oresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange *Physical Review B*, 39(7) :4828–4830, 1989. 61(21) :2472–2475, 1988.
- [35] A. Matthiessen and C. Vogt. Ueber den Einfluß der Temperatur auf die elektrische Leitungsfähigkeit der Legierungen. *Annalen der Physik*, 198(5) :19–78, 1864.
- [36] Nevill Francis Mott. The Resistance and Thermoelectric Properties of the Transition Metals. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical*.
- [37] A. Fert and I. A. Campbell. Two-current conduction in nickel. *Physical Review Letters*, 21(16) :1190–1192, 1968. *Engineering Sciences*, 156(888) :368–
- [38] J. C. Slonczewski. Conductance and exchange coupling of two ferromagn separated by a tunneling barrier. *Physical Review B*, 39(10) :6995–7002.
- [39] M. Julliere, *Phys. Lett. A*, **54** (3) (1975) 225.
- [40] W.J. Gallagher and S. P. P. Parkin, "Development of the magnetic tunnel junction MRAM at IBM: From first junctions to a 16-Mb MRAM demonstrator chip", *IBM J. Res. & Dev.* **50**(2006), 1-5.

- [41] A. Fert, Rev. Mod. Phys, **80** (2008) 1517.
- [42] J. Cibert et D. Ferrand, « Ferromagnétisme contrôlé par les porteurs dans les semi-conducteurs magnétiques dilués », Images de la Physique (2003-2004) 99.
- [43] David Plantier, *Etude par spectroscopie Raman des excitations de faibles énergie dans les semi-conducteurs soumis à des champs magnétiques intenses*. Thèse doctorat. Université Joseph Fourier- Grenoble 1, France (2003).
- [44] G.Schmidt,D.Ferrand,L.W.Molenkamp, A.T.Filip,B.J.van Wees,Phys.Rev B 62, R4790 (2000).
- [45] J. K. Furdyna, Diluted magnetic semiconductors, Journal of Applied Physics, 64 (1988), pp R29_R64.
- [46] I. Hwang, H. Kim, J.-E. Kim, H. Y. Park, and H. Lim, Solid solubilities of magnetic ions in diluted magnetic semiconductors grown under equilibrium conditions, Phys. Rev. B, 50 (1994), pp. 8849_8852.
- [47] H. Saito, V. Zayets, S. Yamagata, and K. Ando, Room-Temperature Ferromagnetism in a II- VI Diluted Magnetic Semiconductor $Zn_{1-x}Cr_xTe$, Phys. Rev. Lett 90 (2003), p. 207202.
- [48] S. Kuroda, N. Nishizawa, M. Mitome, Y. Bando, K. Osuch, and T. Dietl, Origin and control of high-temperature ferromagnetism in semiconductors, Nature Materials, 6 (2007), p. 440.
- [49] P. J. Wellmann, J. M. Garcia, J.-L. Feng, and P. M. Petroff, Formation of nanoscale ferromagnetic MnAs crystallites in low-temperature grown GaAs , Applied Physics Letter (1997), pp. 2532_2534.
- [50] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, Phys. Rev. B 63, 195205 (2001).

Chapitre II

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

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 [2]. 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.

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

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.

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

Avec

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

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

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

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

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

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 La méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW) :

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : Linearized Augmented Plane Wave), développée par Andersen [2], est fondamentalement une amélioration de la méthode dite des ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) élaborée par Slater [3 ,4]. Dans cette approche, l'espace de la matière est divisé en deux régions : une région 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 :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & \text{à l'intérieur de la sphère} \\ \sum_K V_K(r) e^{iKr} & \text{à l'extérieur de la sphère} \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

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.3.1 La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

II.3.1.1 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 [5,6] 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 considéré 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 » [7].

II.3.1.2 Principe de la méthode des Ondes Planes Augmentées (APW) :

Selon cette approximation, la cellule unitaire se divise en deux régions.

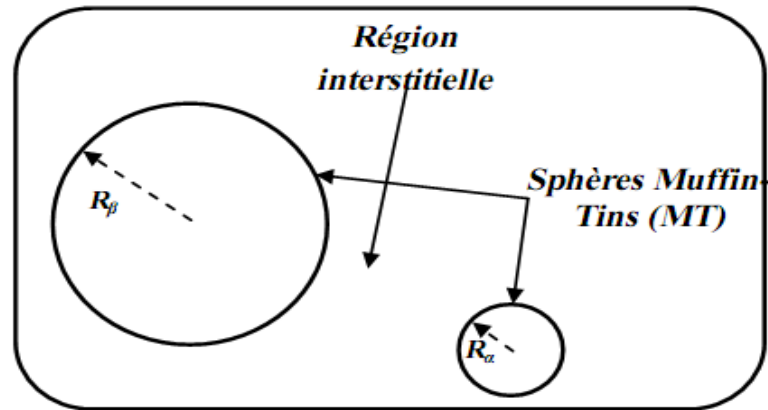


Figure II.1- Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β , respectivement.

- La première région décrit les sphères appelées les sphères « Muffin-tin » [8] 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 :

$$\varphi(\vec{r}) = \begin{cases} \varphi_I(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} & r > R_\alpha \\ \varphi_S(\vec{r}) = \sum_{lm} A_{lm} U_l^\alpha(r, E_I) Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.2})$$

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

Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.

$U_l^a(r, E_l)$: La fonction radiale.

$Y_{lm}(r)$: L'harmonique sphérique.

C_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:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (II.3)$$

$V(r)$ est la composante sphérique du potentiel Muffin-Tin et E_l l'énergie de linéarisation. Les fonctions radiales définies par l'équation (II.3) sont orthogonales à n'importe quel état propre du cœur. Cette orthogonalité disparaît à la frontière de sphère [9] comme le montre l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_2 - E_1)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2 rU_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 rU_2}{dr^2} \quad (II.4)$$

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.4) 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 est 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^o(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 :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G j_l(|K+g|R_\alpha) Y_{lm}^*(K+G) \quad (\text{II.5})$$

Où sont les fonctions sphériques de Bessel, provient de la surface des sphères Muffin-Tin. [8].

A partir de cette équation (II.4), 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_l . En conséquence, l'énergie E_l 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.4) 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 [9] et par Andersen. [10]

II .3.2 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 [11, 12], Koelling et Arbman [11, 13] 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.3) et la fonction $U_l(r)y_{lm}$ doivent satisfaire la condition suivante :

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

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 [14] :

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

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} & r > R \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_0) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_0)] Y_{lm}(r) & r < R \end{cases} \quad (II.7)$$

Où

E_l : est l'énergie de linéarisation, B_{lm} sont les coefficients qui correspondents 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 [11] où la fonction $U_l(r)$ peut être développée en fonction de dérivée $\dot{U}_l(r)$ et de l'énergie E_l :

$$U_l(r, E) = U_l(r, E_l) + (E - E_0) \dot{U}_l(r, E_0) + O\left((E - E_l)^2\right) \quad (II.8)$$

Où

$$\dot{U}_l(r, E_0) = \frac{\partial U_l(r)}{\partial E} \quad (II.9)$$

$O((E - E_1)^2)$: 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 bandes de l'ordre de $(E - E_1)^4$. Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPWS 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 .3.2.1 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 Variation.

- ❖ Dans la méthode LAPW, le temps de calcul est considérablement Réduit et la convergence rapidement atteinte.

II .3.3 Le principe de la méthode FP-LAPW :

La méthode des ondes planes augmentées linéarités à potentiel total [15] Combine 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 [11,16]. 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 :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_{\alpha} \\ \sum_K V_K(r) e^{iKr} & r > R_{\alpha} \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

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

$$\rho(r) = \begin{cases} \sum_{lm} \rho_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_{\alpha} \\ \sum_K \rho_K(r) e^{iKr} & r > R_{\alpha} \end{cases} \quad (\text{II.11})$$

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.4 Rôles des énergies de linéarisation (E_l) :

Les fonctions U_l et \tilde{U}_l sont orthogonales à n'importe quel état de coeur 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[17]. 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_l . Dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_l . 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.

II.5 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 [18] (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 coeur 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 .

KGEM: 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 coeur et les densités.

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

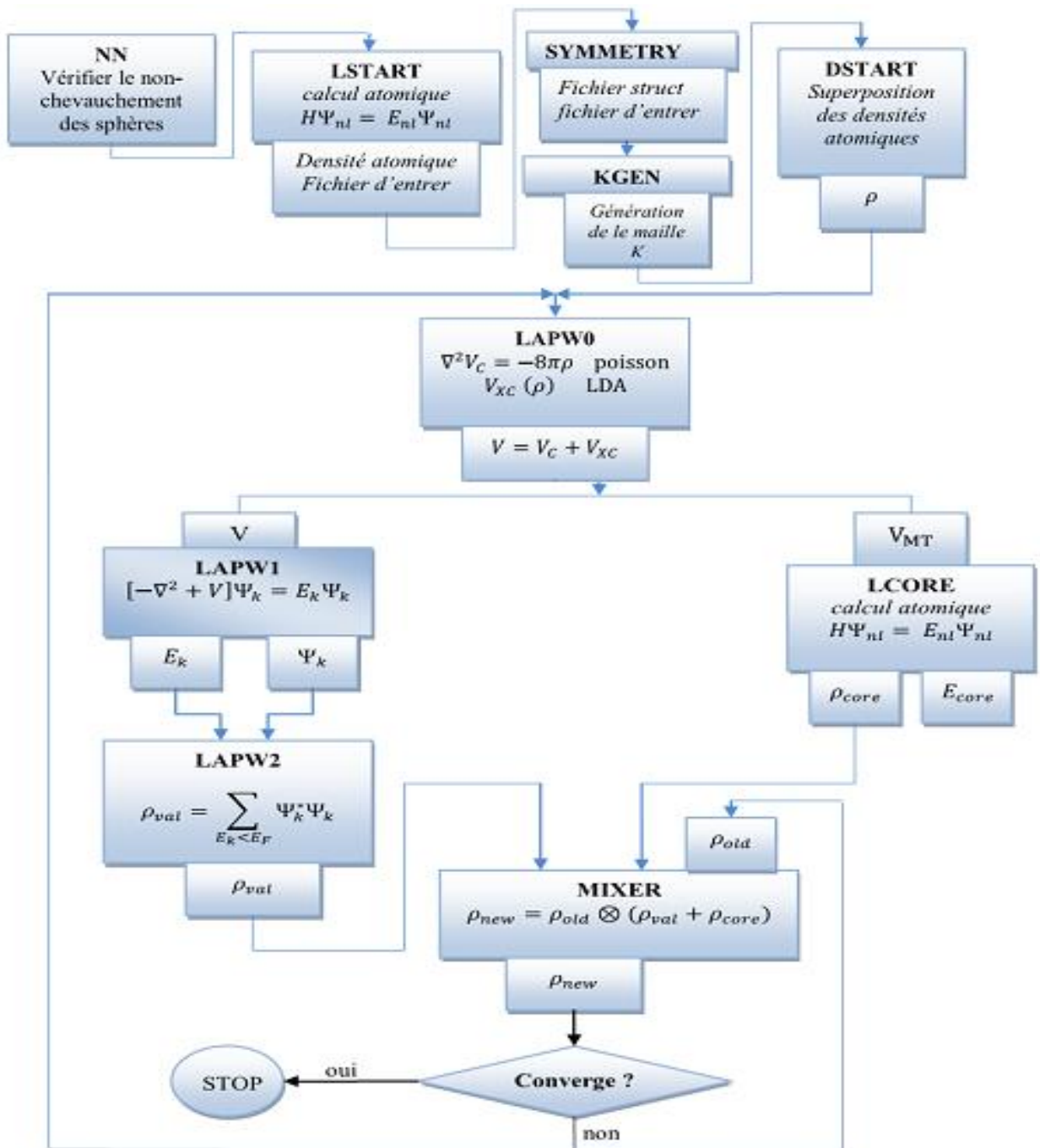


figure II.2 - Le code Wien2k [19].

II.6 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[20].

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

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int f[\rho(r), \nabla\rho(r)] d^3r \quad (\text{II.12})$$

La GGA est donnée pour différentes paramétrisations parmi elles celle de perdew et ses collaborateurs.

Références :

- [1] O.K. Andersen, Phys. Rev B 12, 3060 (1975).
- [2] K. Endo, K.Yamamoto, and K. Deguchi, J. Phys. Chem. Solids 54, 15 (1993).
- [3] A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 39, 1760 (1989).
- [4] R. Wentzcovitch, K.J. Chang and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 34, 107 1 (1 986).
- [5] J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
- [6] R.M.Martin, "Electronic Structure" (Cambridge university press, 2004).
- [7] Adrain P. Sutton, electronic Structure of Materials, Clarendon Press. Oxford (1992).
- [8] J.S Slater Wave function in a peridodic potential, phy.Rev.51:846-851. (1937).
- [9] D.D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5,2041 (1975).
- [10] O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [11] S.Blugel et G.Bihlmayer, "Full-Potential Linearized Augmented Planewave Method" (John von Neumann Institute for Computing, 2006).
- [12] O. K. Andersen, "Linear Methods in Band Theory", Phys. Rev. B 12: 3060, 1975.
- [13] 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.
- [14] J.M. Thijssen, Delft University of Technology, Computational Physics, Cambridge University press (1999).
- [15] P. Hohenberg and W. Kohn, " Inhomogeneous electron gas ", Phys. Rev.B 136: 864, 1964.
- [16] D. R Hamann, Phys. Rev. Lett. 212, 662 (1979).
- [17] A. Canning, W. Mannstadt, A.J. Freeman, Computer Physics Communications 130, 233–243 (2000).
- [18] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2001) 5815.
- [19] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, WIEN97. Technical University, Vienna, (1997).
- [20] R.G.PARR ET W. YANG .Density-Functional Theory of atoms and Molecules. OXFORD UNIVERSITY PRESS, (1989).

Chapitre III

Résultats de calcul et interprétations

III.1 Introduction :

Depuis la découverte de la propriété demi-métallique dans les composés semi-conducteurs par Groot et al [1], plusieurs composés demi- métalliques ferromagnétiques ont été prédites par la théorie et confirmé expérimentalement pour différentes classes de matériaux à titre d'exemple les oxydes métalliques tels que CrO₂ [2]. Les semi-conducteurs magnétiques dilués tels que GaN dopé Mn [3], et récemment le ZnO dopé par le cuivre [4,5].

Étant donné que les composés demi- métalliques dans la structure zinc-blende sont très intéressants pour les applications spintronique (*structure simple, la température de Curie élevée, et fort moment magnétique*), de grands efforts sont faits pour découvrir des nouveaux matériaux dans cette structure. En l'an 2000, Akinage et ses collaborateurs [6] ont élaboré le composé CrAs sur des substrats de GaAs et ont reporté une température de Curie supérieure à 400 K. Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de calcul de la stabilité structurale et des propriétés électroniques des composés (Ga_{1-x}Cr_xAs), Nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel complet (FP-LAPW) implémentée dans le code wien2K [7]. L'ensemble des calculs est basé sur l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) [8] associée à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [9, 10].

Dans ce chapitre deux parties, la première partie consiste à déterminer la structure et la phase magnétique la plus stable. La seconde consiste à étudier les propriétés électroniques dans la structure la plus stable, à savoir la structure de bande et la densité d'états électroniques.

III.2 Propriétés structurales :

La première étape importante dans un calcul ab-initio est la détermination des propriétés structurales d'un matériau à étudier. La connaissance de ces informations nous permet d'accéder par la suite à d'autres propriétés physiques électroniques, magnétiques).

Comme mentionner précédemment GaAs est semi-conducteur de la famille III-V cristallise dans une structure de zinc blende, Cette structure est constituée de deux réseaux cubiques faces centrées, dans cette structure les cations Ga^{+3} occupent les sommets et les centres de six faces, et les anions As^{-3} occupent la moitié des sites tétraédriques. Donc la maille comporte 4 cations Ga^{+3} et 4 anions As^{-3} calculés : $8.1/8 + 6.1/2$. L'arrangement des atomes dans chacune des mailles est représenté dans la figure III.1 :

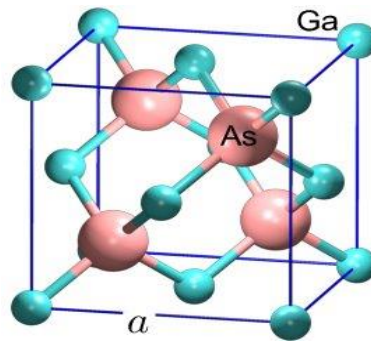


Figure III.1 - Maille élémentaire de GaAs en phase zinc blende.

Les données structurales à l'équilibre sont obtenues par l'ajustement de l'énergie total en fonction du volume à $T=0$, en utilisant l'équation d'état de Birch Murnaghan [11].

$$E_{tot}(v) = E_0(V) + \frac{B_0(v)}{B'(B'-1)} \left[B \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} \right] \quad (\text{III.1})$$

Où V est le volume de la maille. 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. 3 Paramètres d'équilibre :

L'optimisation structurale dans la structure zinc blende du (GaAs) est simple car on a que le paramètre du réseau a . Elle s'effectue, en faisant varier l'énergie totale en fonction du volume V obtenue dans la phase structurale étudiée pour le composant GaAs dans l'approximation GGA-WC. Elle est représentée sur la (figure III.2).

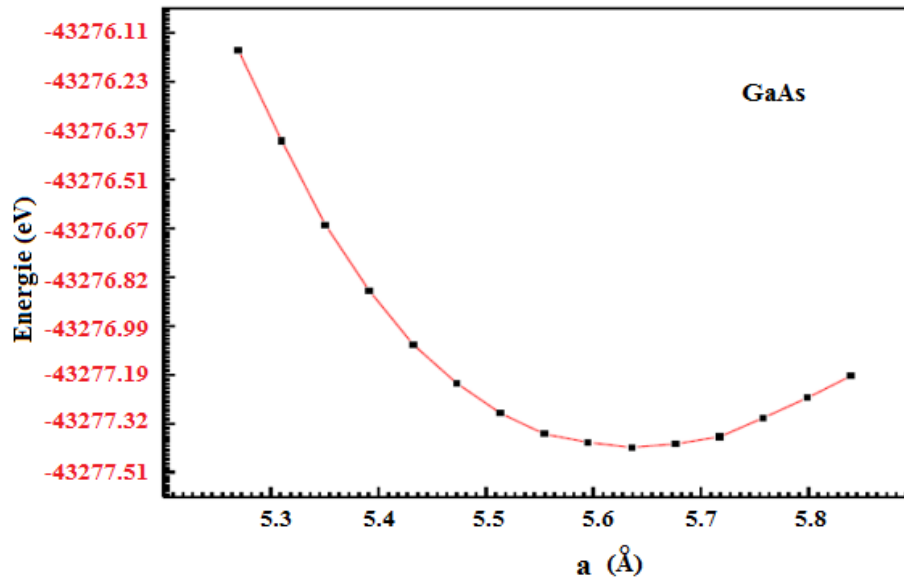


Figure III.2 - Variation de l'énergie totale du GaAs en fonction du volume.

Les résultats obtenus indiquent que le paramètre de maille correspondant à l'énergie minimale du système est de 5.668 Å. Le tableau III.1 présente les résultats des valeurs de paramètre de maille ainsi que les valeurs du module de compressibilité et sa dérivée comparées aux valeurs expérimentales et théoriques des composant GaAs et $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ aux concentrations ($x= 0.25, 0.125$), utilisant l'approximation de la (GGA-WC).

Tableau III.1 Calcul de la constante de réseau (a), module de volume (B) et de son dérivé de pression (B') pour GaAs et $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ aux concentrations ($x= 0.25, 0.125$).

Composé	Paramètre de maille a	B	B'	Méthode
Nos calculs	5.668	68.30	4.45	GGA-WC
GaAs				
Ga_{0.75}Cr_{0.25}As	5.654	69.80	4.27	GGA-WC
Ga_{0.875}Cr_{0.125}As	5.631	71.21	4.10	GGA-WC
théorique	5.748 ^a	60.8 ^a		
	5.726 ^b	68.0 ^b		
expérimental	5.654 ^c	76.0 ^c		expérimental

Réf a [12]. Réf b [13]. Réf c [14].

Par comparaison des résultats théoriques avec les données expérimentales, Nous pouvons observer sur la tableau (III.1) que la valeur de module de compressibilité « B » pour le composé binaire GaAs est inférieure par rapport a celle de l'expérimentale ceci indique le composé naturel expérimentale est plus rigide et résistant a la compression par rapport au données calculées par la GGA.WC, avec une petite augmentation de ces valeurs calculées en utilisant le même méthode concernant les structures ternaires **Ga_{0.75}Cr_{0.25}As** et **Ga_{0.875}Cr_{0.125}As**. Par conséquent, On peut dire que hybridation du GaAs aux concentrations (0.25 et 0.125) par le composant binaire augmente un peu la résistivité des composés par rapport à la pression. Nos résultats obtenus du « B » sont globalement du même ordre que les autres résultats de la littérature.

Les constantes de réseau calculées pour les différentes compositions (GaAs, et $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ à la concentration ($x= 0.25, 0.125$) varient de façon presque linéaire, On retrouve le Comportement habituel de la surestimation du paramètre du réseau et nos résultats ont donc une cohérence interne. D'autre part, les géométries prédites par nos calculs FP-LAPW sont raisonnablement proches des valeurs prédites par d'autres calculs.

Couramment, nous pouvons dire que l'approximation de gradient généralisé GGA-WC choisie nous a donné des résultats concordant bien avec les mesures expérimentales et les résultats théoriques obtenus par d'autres travaux utilisant différentes méthodes DFT.

III.4 Propriétés électroniques des semi-conducteurs $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$:

Une fois le calcul auto-cohérent à l'équilibre est fini, il est possible d'accéder aux propriétés physiques des matériaux étudiés. Ces propriétés peuvent se présenter sous plusieurs formes, entre autres, les propriétés électroniques, dont l'importance réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et de comprendre la nature des liaisons et les interactions qui se forment entre les différents éléments de ces matériaux ; elles comprennent les structures de bandes et les densités d'états électroniques.

III.4.1 Champ cristallin tétraédrique :

Dans le champ cristallin tétraédrique crée par l'encerclement des quatre anions As^{-3} au centre positif de métal de transition Cr^{+3} , les niveaux d'énergie orbitales éclatent en deux niveaux d'énergie t_2 et e . Cette coordination est lié de près de la géométrie cubique que constitué ainsi au point de départ commode pour obtenir le diagramme de doublement des orbitales de champs cristallin pour le complexe ML_4 crée par l'hybridation SP_3 de géométrie tétraédrique.

Dans la disposition tétraédrique (figure III.4) par substitution d'atomes de gallium avec un atome de métal de transition de chrome dans une structure binaire pour formé de l'arséniure de gallium de la forme ternaire ($\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$), l'hybridation du SP_3 , qui se forme sous l'action concomitante de quatre anions arséniure de la géométrie tétraédrique. L'état 3D du chrome dégénéré initialement perdu 3 électrons selon la règle Hund ($\text{Cr}^{+3} \equiv [\text{Ar}] 3d^3 4s^0$) doit être divisé en deux niveaux d'énergie complètement différents, le niveau d'énergie la plus basse e formé par les orbitales de symétrie axiale dx^2-y^2 et dz^2 et le niveau de haute énergie t_2 entièrement composée des états ($3d_{xy}$, $3d_{yz}$ et $3d_{xz}$).

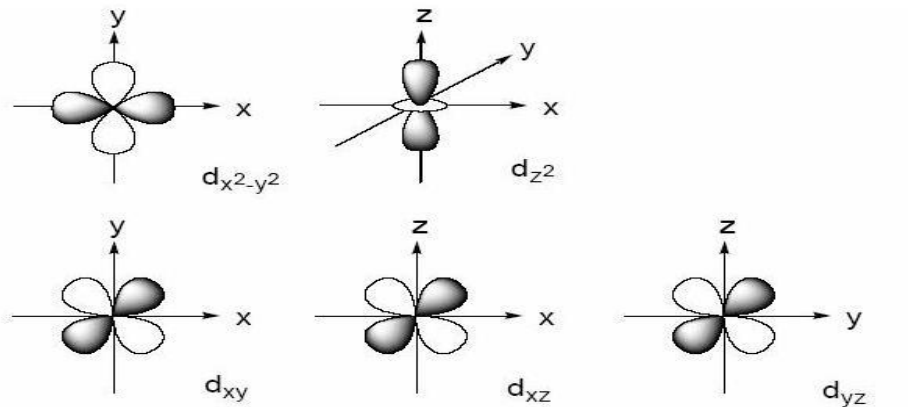


Figure III .3 - Disposition spatiale des cinq orbitales d .

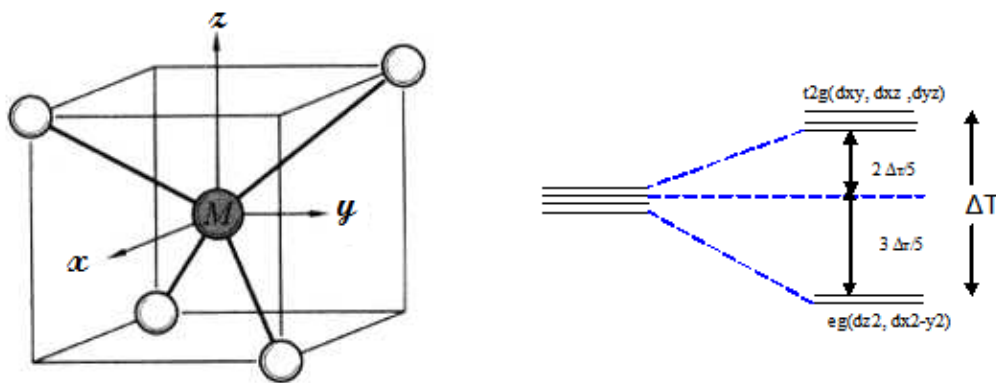


Figure III.4 - Influence du champ cristallin sur les niveaux d'énergie des orbitales d de champ Tétraédrique.

III.4.2 Structure de bandes :

Le calcul de la structure électronique joue un rôle important dans la détermination des propriétés électroniques des composés ternaires, en particulier, dans la prédiction du ferromagnétisme demi-métallique.

Pour cela, nous étudions les structures de bandes de composé binaire GaAs et de dopage ternaire ($\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ à la concentration $x=0.25, 0.125$), Les calculs de la structure de bandes électroniques doivent être effectués très soigneusement et ont été effectués par la résolution des équations de Kohn-Sham avec le formalisme du GGA-WC au moyen de la

méthode FP-LAPW. Les valeurs des gaps et pour confirmer le caractère des demi-métaux de certain dopage. Pour cela nous avons besoin de calculer le spin gap qui est la différence entre le niveau de Fermi et le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction.

Les calculs ont été réalisés en utilisant les paramètres cristallins optimisés par nos calculs. Les bandes d'énergie donnent des énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes sont donc représentées dans l'espace réciproque, et pour simplifier, seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées. Pour les semi-conducteurs, le spectre est caractérisé par la présence de bandes de valence et de bandes de conduction qui sont séparées par une bande interdite ou gap. On définit le gap d'énergie comme la différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction.

L'arséniure de gallium comporte une structure cristalline très stable de la zinc-blende est présentée sur la figure III.5. Les calculs ont montré un comportement semi-conducteur de composé binaire GaAs avec un gap direct près de 1.46 eV sur le point de symétrie Γ .

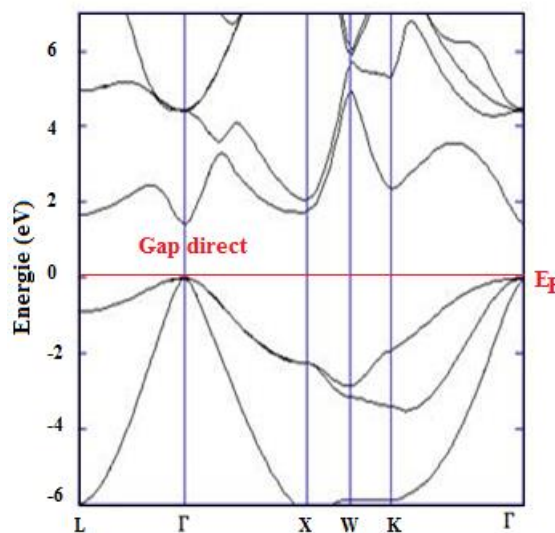
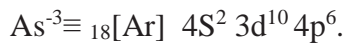
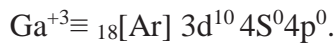
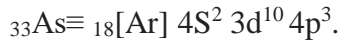
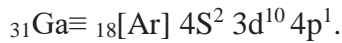


Figure III.5 - La structure de bande de composé GaAs avec un gap direct.

Nous avons préparés les super-mailles de 8 et 16 atomes à partir de la maille

principale binaire pour former les semi-conducteurs Arséniure de Gallium dopés sous leur forme ternaire qui sont dites aussi DMS. Nous avons visés deux concentration (0.25, 0.125) pour étudié l'effet ferromagnétiques de ces alliages ternaires. La substitution d'un cation gallium par le métal de transition chrome au sommet de cube de la maille principale peuvent donner deux structures à concentration respectivement $x=0.25$ et 0.125 soit $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$.

Nous avons donc calculé la structure de bande pour les spins majoritaires et les spins minoritaires à $T=0$ K pour les deux types de structures $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ et $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ par l'approximation GGA-WC. Les figures (III.6) et (III.7) illustrent la structure de bandes calculées pour les spins majoritaires et les spins minoritaires des dopages $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ en ($x=0.25, 125$). On respectant la règle de Hund dans la distribution des électrons sur les orbitales atomiques et de même pour la formation de la liaison ionique dans les composés semi-conducteurs, nous proposons les schémas électroniques suivant pour les atomes, cations et anions.



La structure de bandes nous permet d'avoir une visibilité de l'occupation énergétique des électrons dans un cristal et de ce fait délimiter avec une grande précision les bandes d'énergie permises et par conséquent de déterminer la nature du matériau étudié (isolant, conducteur, semi conducteur) de nos composés. Il est bien connu que l'approximation GGA sous-estime généralement le gap d'énergie. Les calculs de l'énergie de gap de semi-conducteur GaAs et des composés $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$, $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ sont énumérés dans le tableau III.2. Les résultats de gap pour le composé binaire sont en accord avec le calcul expérimentale de S.Adachi [16] et confirme le comportement semi-conducteur à gap direct sur le point de symétrie Γ .

Tableau III.2: Les valeurs du gap énergétique pour le GaAs et alliages $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ et $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$.

Composé	Gap (eV)			Nature électronique
GaAs	1.326	1.42 ^d	1.51 ^e	Semi-conducteur
Ga_{0.75}Cr_{0.25}As	/			Conducteur dans les deux directions de spin
Ga_{0.875}Cr_{0.125}As	1.416 e			Demi-métal avec un gap de 1.41 (eV)

Réf e [15]. *Réf d [16].*

La figure III.6 illustre la structure de bandes calculée pour les bandes des spins majoritaires et les bandes des spins minoritaires de composé $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ dans la méthode d'approximation GGA-WC, d'après nos résultats obtenus nous constatons que pour les électrons de spins majoritaires et minoritaires (up↑ et down↓) la structure de bandes des électrons majoritaires et minoritaires montre un caractère métallique parce que les spins majoritaires (up) et minoritaires sont traversées le niveau de Fermi que signifie l'absence du gap énergétique, alors le composé ternaire $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ est un matériau conducteur dans les deux directions de spins. Par contre, le composé $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ et avec le calcul par la méthode d'approximation GGA-WC représenté dans le (figure III.7) pour les spins majoritaires (up), le niveau de Fermi traverse la bande de conduction qui est décaler vers le bas, mais les spins minoritaires (down) proche le niveau fermi avec l'existence d'un gap énergétique donc le matériau devient semi-conducteur dans la direction spins down. Alors le matériau $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ montrent le comportement demi-métallique qui désigne les deux variétés conducteur dans une direction (spins up) et semi-conducteur dans l'autre direction de spins (spins down).

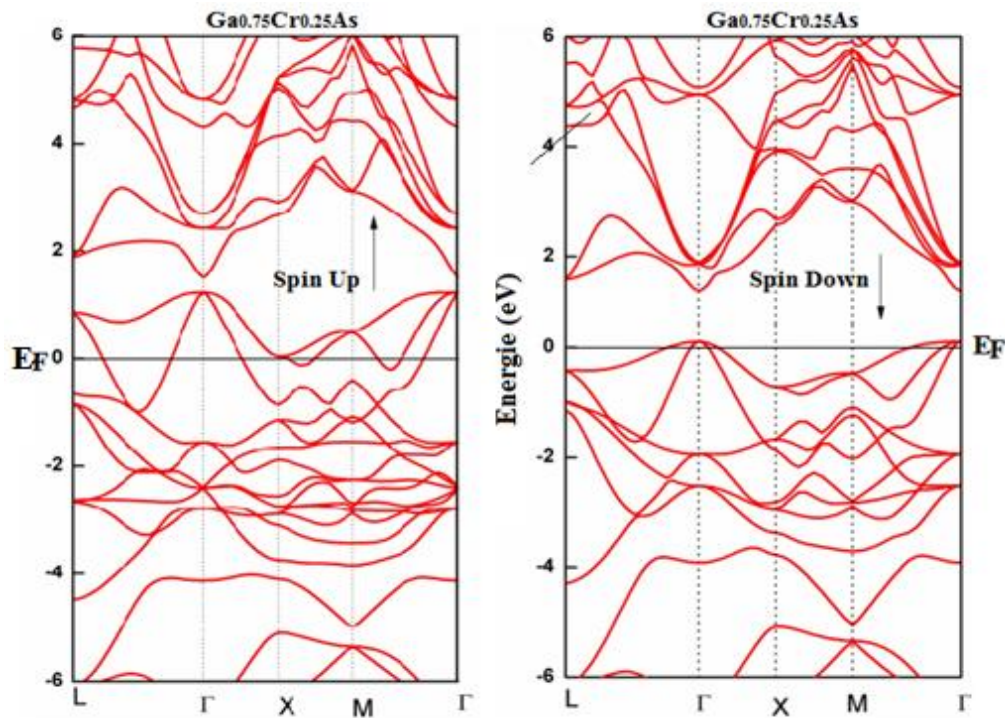


Figure III.6 - Les structures de bandes d'énergie (\uparrow up et \downarrow down) calculées pour dopage ($\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$) dans la phase zinc blende avec l'approximation (GGA).

On résume que pour le dopage l'arséniure de gallium a partir le élément de transissant chrome a la concentration ($x=0.125$), indique que ce composé $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ est de demi-métal ferromagnétique (Half Métal Feromgétaique) où les spins sont polarisés à 100 % dans la phase zinc blende. L'effet de dopage de chrome sur l'arséniure de gallium est très sensible pour le comportement demi-métallique ferromagnétique, ceci est dû à la bande interdite créé près de niveau de Fermi pour les états de spins minoritaires aux changements dans l'hybridation des orbitales atomiques.

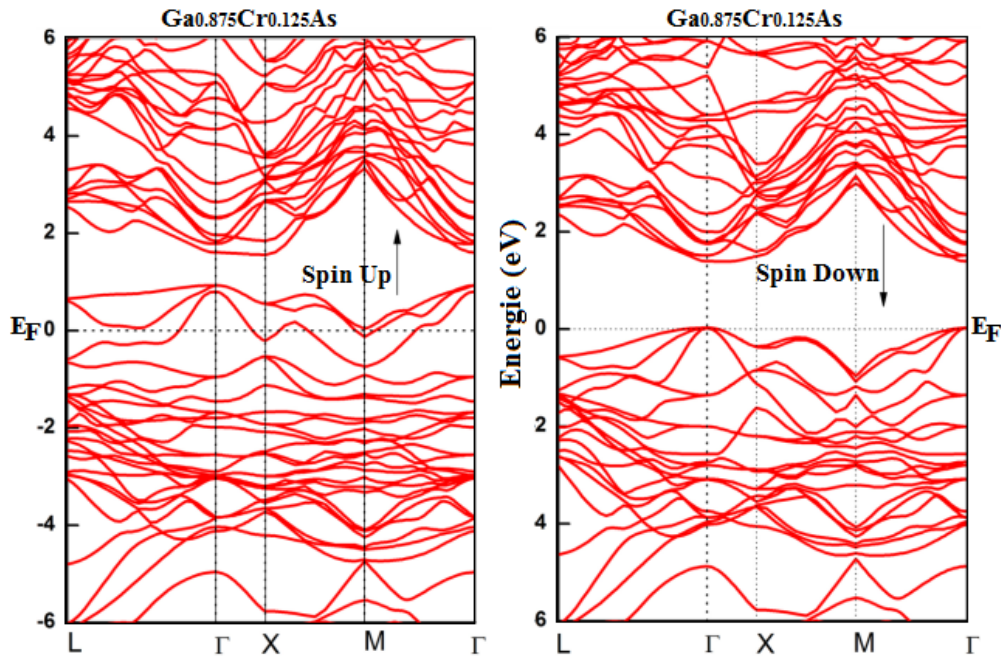


Figure III.7 - Les structures de bandes d'énergie (\uparrow up et \downarrow down) calculées pour dopage ($\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$) dans la phase zinc blende avec l'approximation (GGA).

III.4.3 Densité d'états électroniques (DOS) :

Le calcul de la densité d'état électronique permet de comprendre la structure de bande et son origine. On a utilisé l'approximation GGA-WC pour le calcul de la densité d'états électroniques totale et partielle pour les composés ternaires $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ et $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$. Les schémas III.8 et III.9 indiquent la forte hybridation entre les états 3d de chrome et les états 4S et 4P de l'anion a et que le chrome s'insère dans l'environnement tétraédrique créé par l'encerclement des quatre anions As^{-3} . Alors le comportement de ces deux alliages n'est pas identique. Il décrit deux natures différentes vues la concentration de métal de transition. Le $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ est un composé demi-métallique ferromagnétique parce que les spins majoritaires sont conducteur vue le croisement des bandes de valence au niveau de Fermi, et les spins minoritaires qui décrivent un état semi-conducteur avec un gap dans la zone interdite. Donc le matériau $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ est un conducteur dans une direction et semi-conducteur dans l'autre direction des spins alors il est dit demi-métal. Donc ce composé est favorisé pour les applications au spintronique

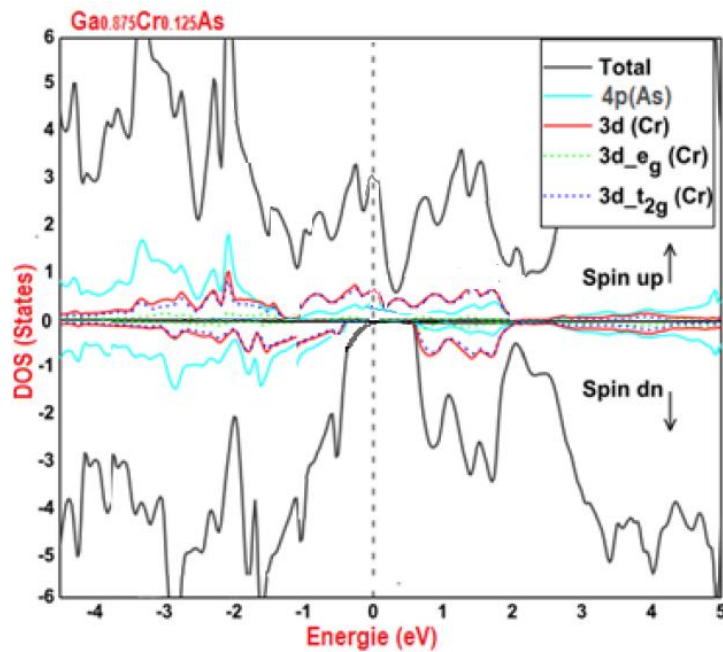


Figure III.8- Les états DOS partielles et totales des spins majoritaires (up) et spin minoritaires (down) de $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$.

Le deuxième composé $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$ présente un caractère purement métallique parce que les bandes de valence traverse le niveau de Fermi dans les deux directions de spins majoritaires et minoritaires en décrivant le comportement métallique au composé $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$.

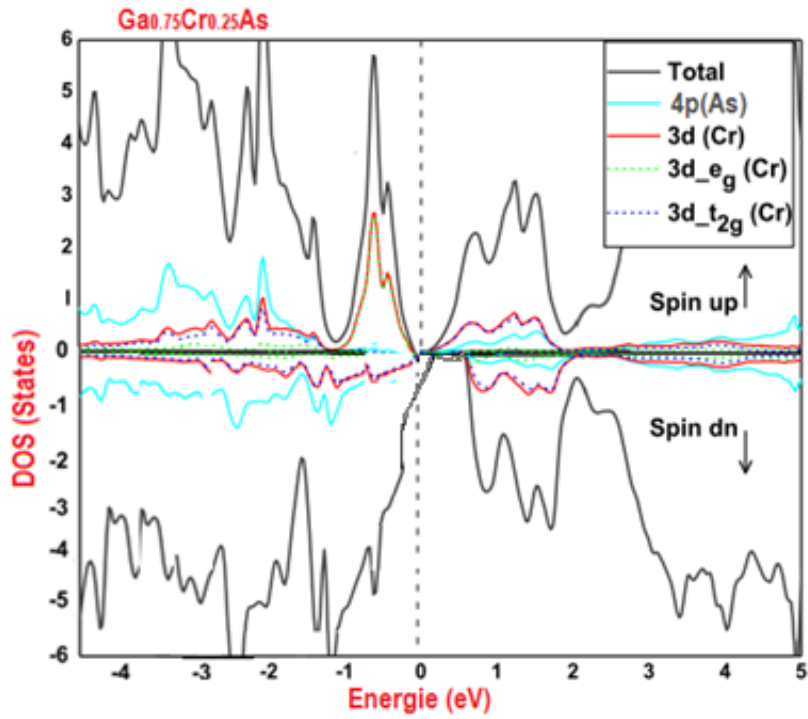


Figure III.9 - Les états DOS partielles et totales des spins majoritaires (*up*) et spins minoritaires (*down*) de $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$.

Référence :

- [1] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys Rev. Lett.* 50, 2024 (1983).
- [2] S. P. Lewis, P. B. Allen, and T. Sasaki, *Phys. Rev. B* 55, 10253 (1997).
- [3] T. Jungwirth, J. Sinova, J. Masek, J. Kucera, and A. H. MacDonald, *Rev. Mod.Phys.* 78, 809 (2006).
- [4] C. Sudakar, K. Padmanabhan, R. Naik, G. Lawes, B. J. Kriby, S. Kumar, and V.M. Naik, *Appl. Phys. Lett.* 93, 042502 (2008).
- [5] M. Ferhat, A. Zaoui, and R. Ahuja, *Appl. Phys. Lett.* 94, 142502 (2009).
- [6] H. Akinaga, T. Manago, and M. Shirai, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 39, L1118 (2000).
- [7] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *wien2k*, an augmented plane wave program for Calculating crystal properties, Vienna University of Technology, Vienna, Austria, 2001.
- [8] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [9] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev* 136, B864 (1964).
- [10] W. Kohn and L.J. Sham, *Phys. Rev* 140, A1133 (1965).
- [11] Murnaghan, F., *The compressibility of media under extreme pressures*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 1944. **30**(9): p. 244-247.
- [12] R. Ahmed, S. J. Hashmifar, H. Akbarzadeh, M. Ahmed, F. Aleem, *Comput. Mater. Sci.*9(2007) 580.
- [13] Viktor N. Staroverov, Gustavo E. Scuseria, Jianmin Tao, John P. Perdew, *Phys. Rev. B* 69 (2004) 075102.
- [14] B. Fillipi, D.J. Singh, C.J. Umrigar, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 14947.
- [15] S. Q. Wang, H.Q. Ye, *J. Phys.: Condens. Matter* 14 (2002) 9579.
- [16] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* 53 (1982) 8775.

Conclusion générale

Ce travail permis l'étude des propriétés structurales et électroniques des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) de type III.V, à savoir les systèmes binaires pour le semi conducteur GaAs à gap 1.326 eV direct dopé par Chrome à concentration (0.25 ,0.125) en résultant les semi-conducteurs magnétiques dilués ($\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$) et ($\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$).

La théorie utilisée pour calculer les propriétés de nos matériaux est celle des ondes planes a potentiel complet ou ondes planes augmentées linéarisées (*FP-LAPW*) implémentées respectivement dans logiciel Wien2k. Les calculs sont réalisé avec la théorie de la fonctionnelle de la densité où les fonctions sont traités par l'approximation d'échange et de corrélation du gradient généralisé (*GGA-WC*), sont tous utilisés pour calculé les propriétés structurales et électroniques de nos matériaux.

Les résultats obtenus de ce travail peuvent être résumés par les points suivants :

En première temps et avons calculé les propriétés structurales du GaAs pur dans la phase blende de zinc. Les paramètres cristallins utilisés dans nos calculs ont été obtenus par une minimisation de l'énergie totale du système en utilisant l'approximation GGA-WC. On a pu ainsi déterminer les paramètres du réseau, le module de compressibilité B et sa dérivée première B' ainsi que l'énergie de cohésion. Les résultats obtenus sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales et théoriques.

Après nous sommes passés à l'étude des propriétés électroniques des alliages ($\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$), en effet, nous avons calculé les structures de bandes d'énergie ainsi que les densités d'états électroniques (DOS). À propos ces derniers, ils montrent que GaAs est un semi-conducteur à gap direct, et que leurs alliages en concentration $x=0.125$ $\text{Ga}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{As}$ présentent un caractère demi-métallique. Tandis que à la concentration $x=0.25$ $\text{Ga}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{As}$, ce matériau DMS prestant un caractère de conducteur. L'analyse des contours de densité de charge indique que le caractère ionique est prédominant entre

Conclusion générale

les atomes par une forte hybridation de type SP_3 et une géométrie tétraédrique qui forment les composés étudiés dans ce travail.

Nous estimons que le caractère demi-métallique dans ce type de matériaux est très sensible aux concentrations de dopage. Pour ce fait, il est conseillé d'utiliser des DMS à faible proportion magnétique.

Caractère de demi-métallique ferromagnétique de dopage de chrome dans l'arséniure de gallium

المخلص:

في هذا العمل درسنا الخصائص الهيكلية والإلكترونية لـ $Ga_{0.75}Cr_{0.25}As$ و $Ga_{0.875}Cr_{0.125}As$ كما المنشطات الثلاثية في بنية مزيج الزنك باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة (FP-LAPW) التي تعتمد على نظرية DFT كثافة وظيفية واستخدمنا تقريب التدرج المعمم GGA.WC لمصطلح التبادل والارتباط المحتمل لحساب الخصائص الهيكلية. تشير نتائجنا إلى أن GaAs المنشط بالكروم بتركيز $x = 0.125$ هو شبه معدني مغناطيسي حديدي مع عزم مغناطيسي إجمالي قدره $3\mu B$. تتمركز هذه اللحظة بشكل أساسي على ذرة الكروم.

الكلمات الرئيسية: أشباه الموصلات، نظرية الكثافة الوظيفية، المغناطيسية الحديدية، شبه المعدنية.

Résumé :

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des dopages ternaires $Ga_{0.75}Cr_{0.25}As$ et $Ga_{0.875}Cr_{0.125}As$ dans la structure zinc blende en utilisant la méthode des ondes planes augmentées (FP-LAPW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT et nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA.WC pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation pour calculer les propriétés structurales. Nos résultats indiquent que le GaAs dopé avec le chrome en concentration $x = 0.125$ est demi-métallique ferromagnétique avec un moment magnétique total de $3\mu B$. Ce moment est principalement localisé sur l'atome le chrome.

Mot-clé : semi-conducteur, DFT, ferromagnétique, demi-métallique.

Abstract:

In this work we have studied the structural and electronic properties of $Ga_{0.75}Cr_{0.25}As$ and $Ga_{0.875}Cr_{0.125}As$ ternary doping in the zinc blende structure using the augmented plane wave method (FP-LAPW) which is based on the DFT density functional theory and we used the generalized gradient approximation GGA.WC for the exchange and correlation potential term to calculate the structural properties. Our results indicate that GaAs doped with chromium in concentration $x = 0.125$ is ferromagnetic semi-metallic with a total magnetic moment of $3\mu B$. This moment is mainly localized on the chromium atom.

Keywords: semiconductor, DFT, ferromagnetic, half-metallic.