



République Algérienne Démocratique et
Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique
Centre Universitaire El-wancharissi de
Tissemsilt



Institut de Sciences et de la Technologie
Département de Sciences et de la Technologie

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme
de Master académique en

Filière : **Physique**

Spécialité : **Nanophysique**

Présentée par : **Zerouali Khadra**

Bendjara Chahrazad

Thème

Etude de comportement électronique et magnétique des GaAs dopé par Mn et Cr

Soutenu le,

Devant le Jury :

DAHMANE Fethallah	Président	MCA	CU-Tissemsilt
Mokhtari Mohamed	Encadreur	M.C.A.	CU-Tissemsilt
Boumia Lakhdar	Examinatrice	M.C.B.	CU-Tissemsilt

Année universitaire : 2019-2020

Remerciement

Nous remercions le bon dieu de nous avoir donné la force et le courage nécessaire afin d'accomplir ce mémoire.

Nous remercions Monsieur Mohamed Mokhtari, pour les efforts qu'il n'a cessé de fournir, constamment, pour nous aider, nous orienter et nous soutenir dans la réalisation de ce travail. Son brillant esprit scientifique et sa grande disponibilité ont été déterminants pour faire aboutir cette tâche à son terme.

La présidence du jury a été assurée par Monsieur Lakhdar Boumia. Qu'il trouve ici nos meilleurs respects et toutes nos reconnaissances.

Monsieur Fethallah Dahmane. A bien voulu fournir un effort très appréciable en acceptant d'examiner ce travail et d'en être membre de jury.

Qu'il trouve ici les expressions les plus significatives de nos profondes reconnaissances.

Finalement, nos remerciements vont également à toute personne ayant contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

Khadra zerouali & bendjara chahrazad

Dédicace

Je rends modeste grâce à Dieu de m'avoir donné le courage, la volonté ainsi que la conscience d'avoir pu terminer mes études.

Je dédie ce modeste travail :

A mes très chers parents toute leur tendresse et pour leurs nombreux sacrifices .Que dieu me les gardent.

A toute ma famille spécialement mes frères Djalal, Abd elhamid,

Et Abed Rahmane et Abed Rzag , mes sœurs Bakhta et fatoum Amel , maraïme et hajoj et hassiba a zozo nassima et ainsi qu'à toute la famille ZEROUALI.

A mon encadreur Mohamed mokhtari qui m'a aidé pendant la réalisation de ce mémoire.

A les professeurs tous et les enseignants qui ont collaboré à ma formation depuis A tous les professeurs et les enseignants qui ont collaboré à ma formation depuis Mon premier cycle d'étude.

A tous les personnels qui travaillent au sein de centre universitaire Tissemsilt.

A tous ceux qui m'ont aidé de loin ou de près durant mes études.

A toutes mes amies ; de 2^{ème} année master Nano-Physique.

Khadra zerouali

Dédicace

Très chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études

A ma chère sœur pour son encouragement permanent, et son soutien moral.

A mes chers frères pour leur appui et leur encouragement.

Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infallible.

Merci d'être toujours là pour moi

BENDJARA CHAHRAZAD

Résumé:

Dans ce travail, nous présentons une étude théorique des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du zinc blende $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ en utilisant la méthode de pseudopotentiels dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec une approximation GGA. Nous avons analysé la dépendance des valeurs des paramètres structuraux sur la composition x dans la gamme de $x = 0,25$, $x = 0,75$. De plus, le moment magnétique de $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ a été étudié. L'atome TM est la source la plus importante du moment magnétique total dans ces alliages, alors que les contributions de Ga et As sont mineures. De plus nos résultats vérifient le caractère ferromagnétique semi-métallique du GaAs dopé au TM

ملخص:

في هذا العمل ، نقدم دراسة نظرية للخصائص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية لمزج الزنك $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة الكاملة المحتملة (APW-FP) مع تقريب التدرج المعمم (PBE-GGA) لقد قمنا بتحليل اعتماد قيم المعلمات الهيكلية على التركيب x في النطاق $x = 0.25$ ، $x = 0.75$. كما تم دراسة العزم المغناطيسي لـ $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$. ذرة TM هي أهم مصدر للعزم المغناطيسي الكلي في هذه السبائك ، في حين أن المساهمات من Ga و As طفيفة. بالإضافة إلى ذلك ، فإن نتائجنا تتحقق من الطابع المغناطيسي نصف المعدني.

Abstract:

In this paper, we present a theoretical study of structural, electronic and magnetic properties for zinc blende $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ using the pseudopotentials method within the framework of density functional theory (DFT) with GGA approximation. We have analysed the dependence of structural parameters values on the composition x in the range of $x = 0.25$, $x = 0.70$. Also, the magnetic moment of $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ has been studied. The TM atom is the most important source of the total magnetic moment in these alloys, while the contributions from Ga and N are minor. In addition our results verify the half-metallic ferromagnetic character of TM doped GaAs

Sommaire

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction

Chapitre I : Les semi-conducteurs III-V

I.1. Les semi-conducteurs III-V	4
I.1.1. Définition	4
I.1.2. Propriété physique des semi-conducteurs III-V	5
I.1.2.1. Propriété structurale	5
I.1.2.2. Propriétés électroniques	5
I.2. L'Arséniure de Gallium (GaAs)	6
I.2.1. Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)	6
I.2.2. Propriétés électriques et physiques du GaAs	6
I.3. Avantages et inconvénients du GaAs	7
I.4. Semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)	8
I.4.1. Classification des semi-conducteurs magnétiques	8
I.4.2. Les principaux types des semi-conducteurs magnétiques dilués	9
I.4.3. Les DMS à base des semi-conducteurs II-VI	9
I.4.4. Les DMS à base des semi-conducteurs III-V	10
I.5. Applications	11
I-5-1 Spintronique	11
I.5.2. Magnétorésistance géante (GMR)	11
I.5.3. Magnétorésistance tunnel (TMR)	12
I.5.4. Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM)	13
I.5.5. Spintronique et semi-conducteurs :	14

Chapitre II Résultats et discussions

II-1 Introduction	17
-------------------------	----

II-2 Méthode de calculs	19
II-3 Résultats et discussions	19
II-4 Propriétés structurales	19
II-4-1 Propriétés électroniques de GaAs	20
II-5 Étude des propriétés des alliages ternaires $Ga_{1-x}TM_xAsP$	21
II-5-1 Les propriétés structurales	21
II-5-2 Les propriétés électroniques	22
II-5-3 propriétés magnétiques	24
II-6 Conclusion	24

Liste des figures

- Figure I. 1** Les semi-conducteurs III-V dans le tableau périodique
- figure I.2** Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende.
- Figure I.3** Structure Cristalline du GaAs
- Figure I.4** Classification des semiconducteurs magnétiques. (a) Semi- magnétique concentré (CMS), (b) semi-conducteur magnétique dilué (DMS), (c) conducteur Semi-conducteur non magnétique.
- Figure.I.5** Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle
- Figure I. 6 :** Principe de la TMR pour une jonction magnétique tunnel
- Figure I.7** Schéma d'une cellule mémoire MRAM
- Figure I.8** Représentation schématique du SpinFET
- Figure II.1** Variation de l'énergie totale en fonction du volume du binaire GaAs dans la phase zinc-blende dans l'approximations GGA.
- Figure II.2** la structure de bande : GaAs
- Figure II.3** la Dos totale et partielle de GaAs
- Figure II.4** La structure de bande pour la majorité spin et minorité spin pour les composé GaCr₂₅As₇₅
- Figure II.5** La structure de bande pour la majorité spin et minorité spin pour les composé GaMn₂₅As₇₅

Liste des tableaux

- Tableau I.1** caractéristiques du GaAs
- Tableau II.1** Valeurs du Paramètre du réseau a (Å), du module de compression B (GPa), de sa dérivée B' et de l'énergie totale minimale E_{\min} (Ry) du GaAs dans phase zinc-blende, calculées par la GGA.
- Tableau II.2** Le paramètre du réseau a , module de compressibilité (B), la dérivée module de compressibilité (B') du $\text{Ga}_{1-x}\text{TM}_x\text{As}$ (TM= Mn, Cr)

Liste d'abréviation

DMS : Semiconducteur magnétique dilué

DFT : La théorie fonctionnelle de la densité

GGA : Approximation du gradient généralisé

DOS: La densité d'état

GMR : Magnéto-résistance géante (Giant Magneto-Resistance).

TMR : Magnéto-résistance tunnel (Tunnel Magneto-Resistance).

MRAM : mémoires magnétiques (Magneto-resistive Random Access Memories).

TM : métaux de transition (Transition Metals).

Introduction Générale

Introduction Générale

Depuis l'apparition du premier transistor en 1954, la micro électronique s'est révélée comme un bouleversement technologique majeur de la fin du vingtième siècle. L'amélioration des performances des puces des ordinateurs a pu se réaliser grâce à une diminution accrue des tailles de composants qui sont à l'heure actuelle de l'ordre de quelques distances atomiques. A cette échelle, des obstacles physiques fondamentaux apparaissent et il est nécessaire de prendre en compte la nature quantique des électrons. C'est pourquoi on essaie de trouver de nouveaux axes de recherche, pouvant supplanter l'électronique classique aux dimensions nanométriques. Parmi les alternatives intéressantes se trouve la spintronique qui utilise non seulement la charge mais le spin des électrons pour coder l'information.

Les deux effets principaux de la spintronique étudiés jusqu'à présent sont la magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel (TMR). L'impact de cette nouvelle branche est déjà considérable, dans la mesure où toutes les têtes de lecture des disques durs actuels sont à base de TMR. Cet effet est également exploité dans des Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM).

La possibilité d'utiliser l'électronique de spins «spintronique» en appareils électronique a suscité un intérêt croissant aux semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS). L'intérêt est considérablement augmenté après la découverte du ferromagnétique (FM) DMS à haute température de Curie: $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ (110 K) [1], $\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}$ (300 K) [2] et $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ (940 K) [3]. Dans ces DMS, les concentrations x atteintes sont de l'ordre de 0.05 à 0.15, donc la conductivité métallique est souvent observée. La distribution spatiale des atomes du métal de transition (TM) sont mal étudiés, mais la concentration des trous, qui est généralement beaucoup plus faible que la concentration de TM, et les mesures directes [4,5] indiquent un rôle important des défauts intrinsèques. Au vu de leurs spécificités, Le DMS doit être considéré comme un nouveau groupe de matériaux qui font la recherche microscopique à cause de leur spécificité magnétique.

Notre travail est consacré à l'étude des Semi-conducteurs Magnétiques Dilués (DMS) en utilisant comme semi-conducteur hôte l'Arsenic de Gallium (GaN) dans sa structure cubique à face centrée, utilisé surtout dans le domaine de l'optoélectronique, et comme dopant le manganèse (Mn) et le chrome (Cr).

pour cela notre mémoire est organisé comme suit : le premier chapitre concerne une présentation générale sur les semiconducteurs III-V et leurs propriétés physiques (structurale et électronique) puis on distingue quelques avantages sur ces matériaux, ainsi que des généralités sur les Semiconducteurs Magnétiques Dilués (DMS) pour la spintronique.

Enfin, le dernier chapitre est dédié aux calculs des propriétés physiques des composés

Introduction Générale

GaMn_{0.25}As_{0.75} et **GaCr_{0.25}As_{0.75}** où sont présentés les résultats de nos calculs avec discussion et interprétation ; il est subdivisé en deux parties : la première est consacrée à l'étude des propriétés structurales et électroniques du semi-conducteur GaAs pur et la deuxième à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués : **GaMn_{0.25}As_{0.75}** et **GaCr_{0.25}As_{0.75}**. Ce texte s'achève par une conclusion générale sur les résultats obtenus et la proposition du **GaMn_{0.25}As_{0.75}** et **GaCr_{0.25}As_{0.75}** comme des nouveaux matériaux semi-conducteurs magnétiques dilués, susceptibles de conduire à de futures applications pour la spintronique.

Chapitre I

Les semi-conducteurs III-V

Chapitre I les semi-conducteurs III-V

I.1. Les semi-conducteurs III-V

I.1.1. Définition

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau). Les semi-conducteurs sont principalement les éléments de la colonne IV du tableau de classification des éléments (Si, Ge) mais aussi des composés III-V (GaAs, GaN) ou II-VI (ZnS, CdTe).

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Ils servent de la base pour les dispositifs électroniques et optoélectroniques (figure I.1)

1																	2										
H																	He										
Hydrogène																	Hélium										
3	4															5	6	7	8	9	10						
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne						
Lithium	Béryllium															Bore	Carbone	Azote	Oxygène	Fluor	Néon						
11	12															13	14	15	16	17	18						
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar						
Sodium	Magnésium															Aluminium	Silicium	Phosphore	Soufre	Chlore	Argon						
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr										
Potassium	Calcium	Scandium	Titane	Vanadium	Chrome	Manganèse	Fer	Cobalt	Nickel	Cuivre	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Sélénium	Brome	Krypton										
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54										
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe										
Rubidium	Strontium	Yttrium	Zirconium	Niobium	Molybdène	Technétium	Ruthénium	Rhodium	Palladium	Argent	Cadmium	Indium	Étain	Antimoine	Tellure	Iode	Xénon										
55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86										
Cs	Ba												Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Césium	Baryum												Hafnium	Tantale	Tungstène	Réhenium	Osmium	Iridium	Platine	Or	Mercure	Thallium	Plomb	Bismuth	Polonium	Astato	Radon
87	88																										
Fr	Ra																										
Francium	Radium																										
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106										
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu													
Lanthane	Cérium	Praseodyme	Néodyme	Prométhium	Samarium	Europium	Gadolinium	Terbium	Dysprosium	Holmium	Erbium	Thulium	Ytterbium	Lutétium													
103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118												
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw													
Actinium	Thorium	Protactinium	Uranium	Néptunium	Plutonium	Americium	Curium	Berkélium	Californium	Einsteinium	Fermium	Mendelevium	Nobélium	Lavendium													

Figure I. 1 : Les semi-conducteurs III-V dans le tableau périodique

I.1.2. Propriété physique des semi-conducteurs III-V

I.1.2.1. Propriété structurale

La majorité des semi conducteurs III-V cristallisent dans la structure "Zinc-Blende" présentée sur la figure I.2.). Une telle structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous-réseaux cubique face centrée (CFC), l'un d'éléments III et l'autre d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart du diagonale principale. Dans le cas du phosphore d'Indium, le Phosphore possède cinq

Électrons périphériques et l'indium trois. Dans le cristal, chaque atome de Phosphore est entouré de quatre atomes d'Indium, et chaque atome d'Indium est entouré de quatre atomes de Phosphore. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions (P^+) et (In^-), qui ont tous quatre électrons périphériques.

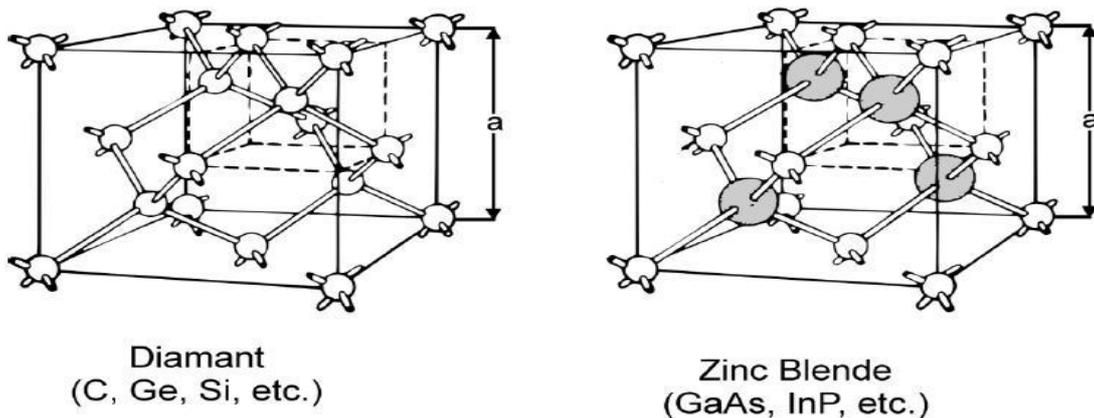


figure I.2 Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende.

I.1.2.2. Propriétés électroniques

La description la plus significative des surfaces d'énergie offertes aux électrons s'effectue dans l'espace réciproque ou espace des vecteurs d'onde k . Les semi-conducteurs III-V que nous utiliserons sont à "transitions directes". Cela signifie que l'énergie minimale de la bande de conduction et l'énergie maximale de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin, ceci à des conséquences importantes du point de vue des propriétés électroniques et optiques.

I.2.L'Arséniure de Gallium (GaAs)

I.2.1. Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)

L'arséniure de gallium (GaAs) est un composé de la famille III-V. Il cristallise dans la structure du Zinc Blende (Figure I.3). son réseau cristallin peut se décomposer en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément du groupe III (Ga), l'autre des atomes de l'élément du groupe V (As) ; Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire d'une quantité de $a_0/4$ (1, 1, 1), a_0 étant le paramètre cristallin, où chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce



Figure I.3 : Structure Cristalline du GaAs

I.2.2. Propriétés électriques et physiques du GaAs

Les propriétés physiques et électriques de l'arséniure de gallium à la température ambiante (300K°) sont regroupées dans le tableau suivant [6]:

Tableau I.1 caractéristiques du GaAs

Propriétés du GaAs à 300K°	Valeur
Structure cristalline	Zinc blende
Poids atomique	144,63 g/mole
Structure de la bande interdite	Directe
Chaleur spécifique	0.327 j/g.K

Largeur de bande interdit	$E_g = 1,424 \text{ eV}$
Permittivité	$11,6 \text{ pF/cm}$
Conductivité thermique	0.45 w/cm.k
Mobilité des électrons	$8500 \text{ cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Mobilité des trous	$400 \text{ cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Vitesse maximal des électrons	$2 \cdot 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$
Champ électrique de saturation	10 k.v/cm

I.3..Avantages et inconvénients du GaAs

Même si le silicium reste le matériau de base le plus largement utilisé dans le secteur des semi-conducteurs, on constate l'émergence rapide de nouveaux marchés demandant des matériaux spécifiques. Le besoin de nouveaux composants pour les y per fréquences, la logique rapide, l'optoélectronique a poussé le développement des matériaux III-V dont les propriétés de transport électronique et les propriétés optiques ne sont pas accessibles au silicium.

Le GaAs, dont les avantages par rapport au silicium résident en particulier dans la possibilité d'obtenir un matériau semi isolant et aussi dans une mobilité électronique plus élevée (sept fois plus grande que celle du silicium). Ces deux dernières propriétés étant favorables à un fonctionnement à fréquence élevée. Ces caractéristiques ont rendu ce matériau très prometteur pour répondre aux nouvelles exigences dans les domaines des hautes fréquences et de l'optoélectronique.

Dans le domaine des composants optoélectroniques, on utilise surtout les propriétés de sa structure de bande (gap direct) et celles de ses composés ternaires et quaternaires (GaAlAs, GaAsP, GaInAs et GaInAsP). Ainsi, le développement de la technologie de fibres optiques à faible perte et la maîtrise de l'élaboration de GaAs ont abouti à la réalisation d'ensembles de télécommunications optiques utilisant des émetteurs lasers à semi-conducteur GaAs et GaAlAs [7].

Un autre atout très important de ce matériau est la possibilité de l'obtenir sous forme Semi-isolant; cet état de résistivité élevée est particulièrement favorable pour le développement d'une véritable technologie planaire de circuits intégrés sur GaAs. Aussi la largeur de sa bande interdite relativement importante qui autorise un fonctionnement à haute température.

L'inconvénient majeur du GaAs est son coût élevé. Par exemple, les circuits intégrés en arséniure de gallium sont beaucoup plus cher : le matériau ne s'obtient qu'en plaquettes de 3 à 4 pouces de diamètre (de 7,5 à 10 cm) au maximum, ce qui limite le nombre de circuits intégrés fabriqués ; sa physicochimie se prête moins bien que le silicium aux associations de matériaux (semi-conducteurs, isolants, métaux) requis par les circuits intégrés, ce qui rend les méthodes de fabrication plus délicates et les rendements de fabrication plus faibles. Ces handicaps limitent l'arséniure de gallium aux utilisations où il est indispensable, à savoir lorsque l'on veut des circuits fonctionnant à des fréquences supérieures à 1 gigahertz.

1.4.Semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS):

Les DMS (Diluted Magnetic Semiconductor) sont obtenus par l'adjonction d'un métal de transition à un semi conducteur.

1.4.1.Classification des semi-conducteurs magnétiques:

Il existe plusieurs types de semi-conducteurs (figure I.4 D'un côté nous avons les semi-conducteurs non magnétiques (c), qui ne contiennent aucun élément magnétique ; et de l'autre les semi-conducteurs magnétiques concentrés (CMS : concentrated magnetic semiconductors) dans lesquels les ions magnétiques sont présents de façon régulière et forment un réseau périodique (a). Chauffer ces matériaux est une façon de perturber cet ordre magnétique et de provoquer le désordre. Ainsi, pour chaque matériau magnétique, il existe une température au-dessus de laquelle il perd ses propriétés magnétiques. Cette température est appelée température deCurie.

Au-delà de cette température les matériaux sont dans un état désordonné dit paramagnétique. Cependant ces matériaux sont difficiles à synthétiser et leur structure cristalline est assez différente des semi-conducteurs classiques comme le Si ou le GaAs. Deplus, leur température de Curie est très basse, typiquement inférieure à 100 K. Les propriétés des semi-conducteurs sont souvent modifiées par dopage. Il suffit d'introduire des impuretés au sein de

leur matrice pour obtenir un composé de type n ou p. En appliquant le même principe avec un dopage en éléments magnétiques, nous obtenons les semiconducteurs magnétiques dilués (b).

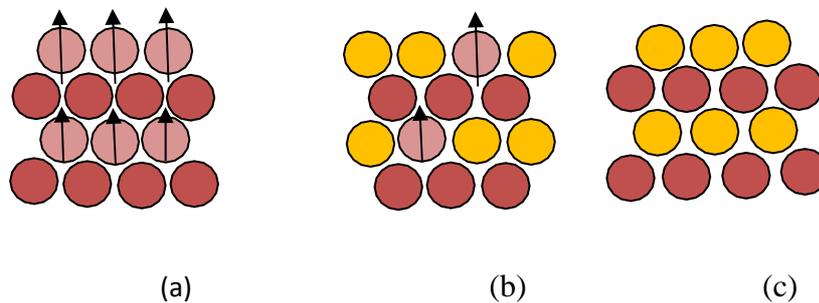


Figure 1.4 : Classification des semiconducteurs magnétiques. (a) Semi-conducteur magnétique concentré (CMS), (b) semi-conducteur magnétique dilué (DMS), (c) Semi-conducteur non magnétique.

I. 4.2. Les principaux types des semi-conducteurs magnétiques dilués :

On peut classer les DMS en fonction de leurs matrices semi-conductrices hôtes en plusieurs types. Les deux principaux types sont :

I.4.3. Les DMS à base des semi-conducteurs II-VI:

Parmi les DMS les plus étudiés, on compte les **semi-conducteurs II-Mn-VI** où les propriétés optiques, magnéto-optiques [8, 9], magnétiques [10] et de transport [11] ont été étudiées. L'intérêt de l'étude de ces composés est que le Mn est parfaitement soluble dans la matrice cristalline, permettant ainsi d'obtenir des couches minces d'excellente qualité. Au début des années 70, les II-Mn-VI étaient obtenus à l'état massif et les propriétés magnétiques de ces matériaux étaient dominées par les interactions de super-échange antiferromagnétiques entre les spins localisés. Ceci induit un caractère paramagnétique, antiferromagnétique ou verre de spin selon la concentration d'ions magnétiques incorporés. Ce n'est qu'avec l'évolution des techniques de croissance avec l'épitaxie par jets moléculaires que les chercheurs sont passés de matériaux massifs à des puits quantiques augmentant ainsi le dopage et permettant l'apparition d'une phase ferromagnétique mais avec une faible température de Curie (TC) [12, 13]. Les études se sont concentrées ensuite sur les propriétés magnétiques, électriques et optiques d'hétérostructures (par exemple puits quantiques, diodes p-i-n) et sur les semi-conducteurs ferromagnétiques dopés avec différents métaux de transition à température ambiante ($Zn_{1-x}Co_xO$, $Zn_{1-x}Cr_xTe$) [14, 15]. Dans les DMS II-VI, les ions magnétiques sont isoélectriques. Donc, ils ne changent pas les propriétés électriques du semi-conducteur. Par conséquent, les propriétés magnétiques et le dopage sont alors découplés.

I.4.4. Les DMS à base des semi-conducteurs III-V:

L'émergence des **DMS III-Mn-V** est plus tardive par rapport aux II-Mn-VI à cause de la

limite de solubilité du Mn dans les matrices cristallines entraînant la formation d'îlots de MnAs en surface [16]. Ce problème de solubilité a été résolu par Munekata et al. en 1989 en synthétisant par épitaxie par jet moléculaire (MBE) des films (In,Mn)As à basse température (250°C) [17]. Si ce type de croissance présente l'avantage de passer la limite de solubilité, elle présente l'inconvénient de matériaux de moins bonne qualité avec de multiples défauts (exemple pour le GaAs basse température). Les couches minces produites avaient une température de Curie TC égale à 7,5K.

En 1996, c'est au tour de (Ga,Mn)As d'être synthétisé pour la première fois par Ohno et al. [18] avec une TC de 60 K. Ce dernier a suscité un grand intérêt, (Ga,Mn)As étant basé sur le GaAs, un des matériaux largement utilisé dans l'optoélectronique et dont on contrôle le mieux la croissance et dont on connaît bien les caractéristiques. Les semi-conducteurs magnétiques dilués étant des matériaux prometteurs vis à vis de l'électronique de spin, il est nécessaire que ces derniers aient une température de curie TC supérieure à la température ambiante permettant ainsi des applications. Dans son article, Dietl et al. [19] prédisait que pour un dopage de 12.5 % de manganèse et 35×10^{20} de porteurs par cm^3 , la température de Curie de GaMnAs est de l'ordre de 300 K. En pratique, cette prédiction ne fut jamais atteinte avec des températures de Curie maximales de 200 K [20] pour des échantillons à forte concentration de Mn (12%). La densité de porteurs est un des paramètres centraux pour atteindre des TC élevées donc cela implique des concentrations effectives en Mn importantes également. Or il est de plus en plus difficile de positionner des atomes de Mn en position substitutionnelle dans la maille pour de trop fortes concentrations à cause de la faible solubilité de Mn. La substitution des ions trivalents Ga^{3+} par des ions magnétiques divalents Mn^{2+} dans la maille introduit à la fois des porteurs de charge itinérants (trous donc un dopage de type p) et un moment magnétique. Le caractère magnétique et le dopage sont totalement liés, ce qui constitue un inconvénient pour l'étude et la compréhension de ces systèmes. Il est aussi difficile d'obtenir des DMS de type pn nécessaires à la formation des jonctions p-n pour les dispositifs de la spintronique à partir de GaMnAs. Donc le développement de GaMnAs est limité par la faible température de Curie, la faible solubilité de Mn et le couplage des dopages électrique (p) et magnétique (xMn). Afin de surmonter ces problèmes, Masek et al. [20] ont proposé théoriquement des semi-conducteurs magnétiques dilués basés sur le semi-conducteur I-II-V LiZnAs, où les éléments du groupe III (Ga) dans le (Ga,Mn)As sont remplacés par les éléments du groupe I (Li) et les éléments du groupe II (Zn). La substitution des ions Zn^{+2} par des ions Mn^{+2} dans LiZnAs introduit seulement un moment magnétique, la concentration des porteurs est ajustée par le dopage avec les atomes de Li.

1.5.Applications

I-5-1 Spintronique :

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

I.5.2. Magnétorésistance géante (GMR)

La première manifestation d'un effet caractéristique de spintronique a été la magnétorésistance géante (Giant Magneto-Resistance, ou GMR), découverte en 1988 à Orsay par l'équipe d' A.Fert [21]. Dans des structures alternant un métal, ferromagnétique et un métal non magnétique, par exemple des multicouches de Fe/Cr [22,23], un changement de résistance important est observé lorsque, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, les aimantations macroscopiques des couches magnétiques successives basculent d'un état antiparallèle à un état parallèle aligné. électrons de spin majoritaire (e^{up}) passent à travers la structure presque sans diffusion (flèche verte), tandis que les électrons de spin minoritaire (e^{down}) sont plus fortement diffusés (flèche rouge). Dans la configuration antiparallèle, les électrons sont tous diffusés et donc la résistance de la structure est plus élevée. électrons de spin majoritaire (e^{up}) passent à travers la structure presque sans diffusion (flèche verte), tandis que les électrons de spin minoritaire (e^{down}) sont plus fortement diffusés (flèche rouge). Dans la configuration antiparallèle, les électrons sont tous diffusés et donc la résistance de la structure est plus élevée.

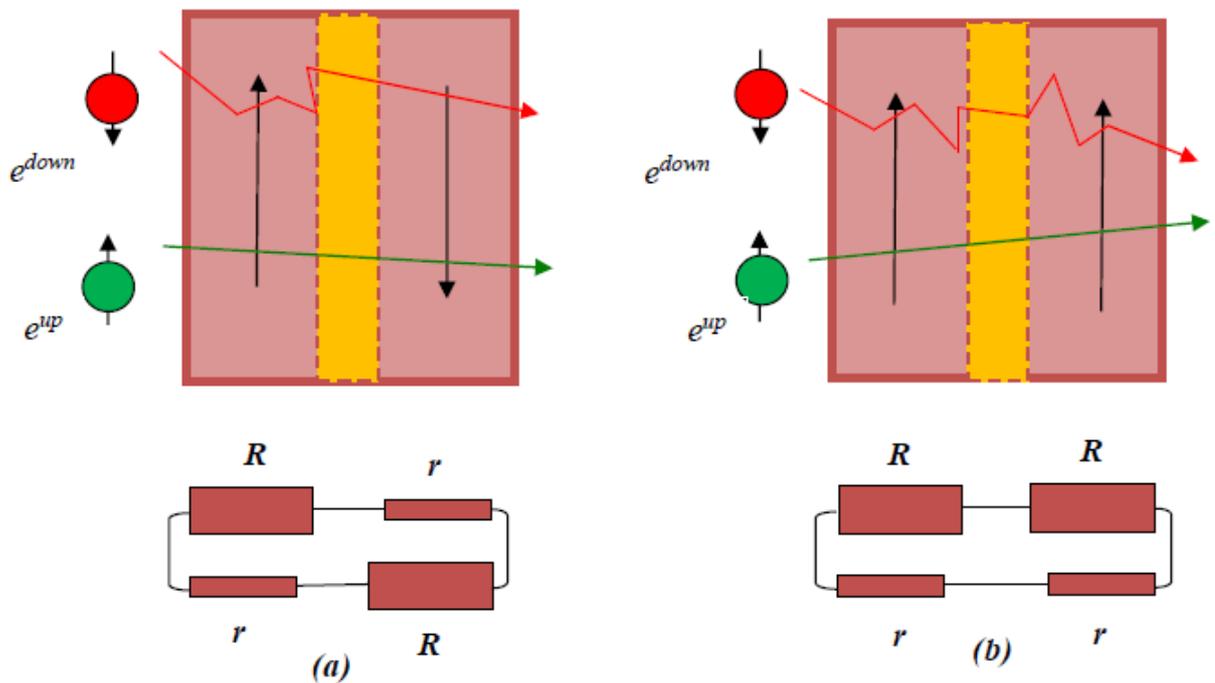


Figure I.5 : Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle

L'application principale de la GMR développée dans les années 90 concerne les têtes de lecture pour disques durs d'ordinateurs. Dans un support d'information, la variation de champ magnétique généré par les transitions entre bits de données est détectée par un petit élément magnéto-résistif. Cet élément transcrit l'information sous la forme de pulses électriques images du changement de résistance. Aujourd'hui, la totalité de la production mondiale des têtes de lecture/écriture pour disques durs est constituée de têtes magnéto-résistives de type vanes de spin.

I.5.3. Magnétorésistance tunnel (TMR) :

Un effet de magnétorésistance similaire à la magnétorésistance géante, appelé magnétorésistance tunnel (TMR), a été observé dans des structures métal ferromagnétique/isolant /métal ferromagnétique (Figure I.6). L'épaisseur de la couche isolante (appelée barrière tunnel) est de l'ordre du nanomètre. Cette couche constitue une barrière d'énergie pour les électrons de conduction. Ceux-ci peuvent néanmoins traverser la barrière par effet tunnel.

L'aimantation d'une des couches métalliques, dite couche de référence, est bloquée dans une direction fixe soit par couplage avec une couche fortement antiferromagnétique, soit du fait de son caractère magnétique plus dur (champ coercitif plus élevé). L'autre couche magnétique, dite libre, conserve la possibilité de changer son orientation selon celle du champ magnétique appliqué. Un changement de configuration des aimantations d'un état parallèle vers un état antiparallèle entraîne donc un changement de courant électrique à travers la barrière tunnel.

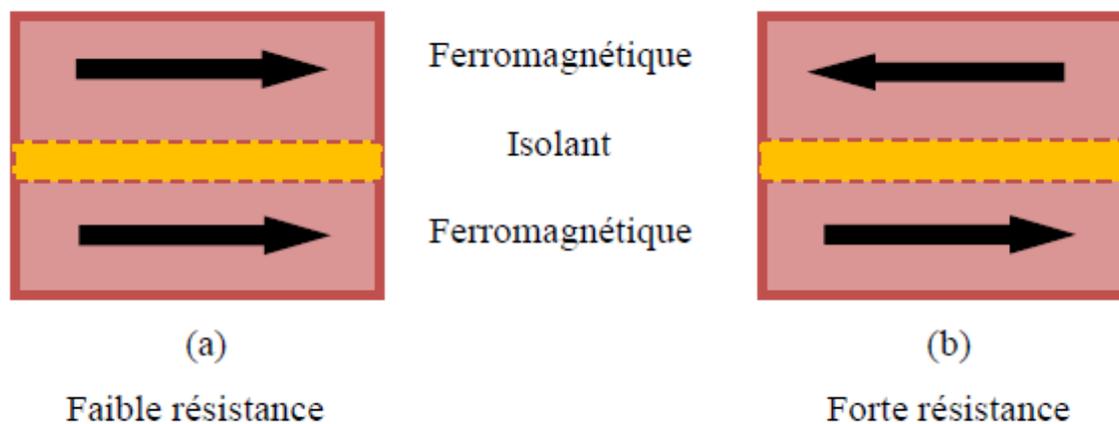


Figure I. 6 : Principe de la TMR pour une jonction magnétique tunnel [24].

I.4.4. Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM):

De nombreuses techniques ont été développées pour stocker l'information binaire. Le principe est de coder cette information par un système ayant un paramètre physique présentant une rémanence et une coercivité, un "1" et un "0" pouvant être codés par l'état de ce paramètre.

Les jonctions tunnels magnétiques peuvent être utilisées dans ce contexte pour coder l'information binaire. L'état magnétique du système permettant de changer la résistance de l'empilement, il est possible de fabriquer des matrices de jonctions de taille submicronique

pour coder une série de "1" et de "0". En pratique, plus la différence entre les deux niveaux de résistance est élevée, plus la lecture de l'état est rapide. La non volatilité des systèmes magnétiques et la démonstration d'écritures sub-nanoseconde permet d'envisager leur utilisation en tant que mémoire de stockage d'une grande fiabilité et de support au traitement de données logiques. De tels systèmes sont appelés mémoires magnéto-résistives à accès direct (MRAM pour "Magnetoresistive Random Acces Memories")[25].

La figure I.7 représente l'architecture des MRAM : une jonction tunnel magnétique connectée en série avec un transistor de sélection, une ligne de bit et une ligne de mot.

L'écriture est effectuée en fermant le transistor et en faisant passer des courants à travers la ligne de bit et la ligne de mot qui se croisent au niveau du point mémoire adressé. On crée ainsi deux champs magnétiques orthogonaux au niveau de la jonction. Ces deux champs sont suffisants pour changer l'orientation de la couche libre. Chaque champ magnétique pris indépendamment ne permet pas le renversement de l'aimantation de la couche libre car le champ magnétique créé à l'intersection des deux courants doit être supérieur au champ coercitif de la couche libre[26].

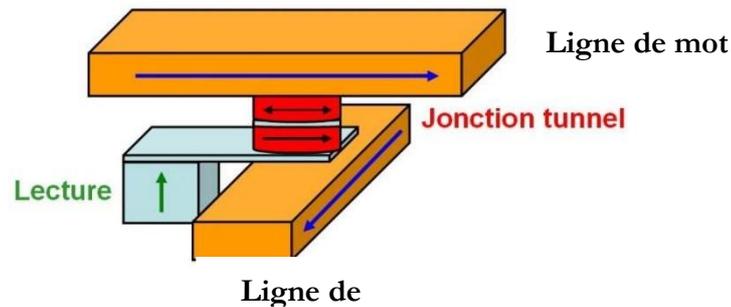


Figure I.7 : Schéma d'une cellule mémoire MRAM [27]

Le principe de 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[26].

1.4.5. Spintronique et semi-conducteurs :

Au-delà des MRAM, la croissance et l'étude d'hétéro-structures semi-conductrices intégrant des matériaux magnétiques représentent un axe de recherche plus exploratoire qui

amènera une nouvelle génération de composants électroniques [26]. La spintronique dans les semi-conducteurs à plusieurs intérêts : les possibilités de moduler le nombre de porteurs, le couplage avec l'optique, un temps de vie du spin plus long que dans les métaux, et donc l'avantage d'une propagation de l'information du spin sur de plus grandes distances [28, 29]. En plus un seul composant pourrait combiner la détection de l'information (stockage dans une mémoire MRAM), son traitement (par manipulation des spins) et sa transmission (du magnétique versoptique).

La première proposition de l'intégration de semi-conducteurs dans la spintronique est la réalisation d'un transistor de spin à effet de champ (SpinFET : Spin Field Effect Transistor), (figurI.8) comme décrit par Datta et Das [30]. Ce dispositif est constitué d'une source et d'un drain en matériau ferromagnétique de moments magnétiques parallèles séparés par un canal constitué d'une hétéro-structure semi-conductrice formant un gaz d'électrons libres bidimensionnel. La source (injecteur de spin) injecte des électrons spin-polarisés dans le canal vers le drain (détecteur de spin). Une tension de grille crée dans le canal un champ électrique qui va provoquer ou non la rotation des spins électroniques par le phénomène de précession de Rashba. Cet effet rend ce dispositif particulièrement intéressant. En effet, Il est possible de faire précesser les spins jusqu'à ce qu'ils soient parallèles ou antiparallèles à la direction de

l'aimantation de l'électrode de drain. Ainsi, si les spins des porteurs injectés restent orientés dans le sens de l'aimantation de la source et du drain, le courant passe (le transistor est ON), alors que dans le cas contraire le courant est plus faible (le transistor est OFF). Une oscillation du courant est ainsi observée en fonction de la tension de grille. Un tel dispositif n'a pas encore été réalisé expérimentalement et reste un des principaux défis de la recherche en spintronique[31].

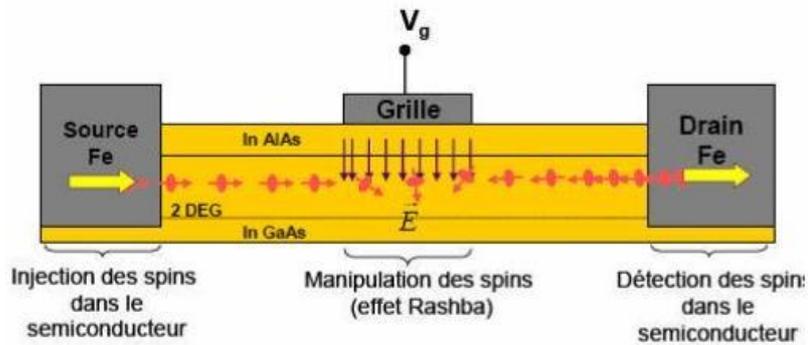


Figure I.8 : Représentation schématique du SpinFET

Chapitre II

Résultats et discussions

II-1 Introduction :

Les propriétés électroniques et magnétiques des composés semi-conducteurs III – V ont été largement étudiées par plusieurs techniques au cours des dernières décennies [32]Récemment, les composés semi-conducteurs III – V ont fait l'objet de recherches approfondies notamment dans le développement des lasers IR, des photodiodes, des cellules solaires et des convertisseurs thermo photovoltaïques. Les dispositifs optoélectroniques basés sur GaAs présentent un grand intérêt dans les applications technologiques, telles que la spectroscopie à haute résolution des diodes laser et la communication par fibre optique [33]En raison de sa grande mobilité, le GaAs est considéré parmi les matériaux les plus intéressants pour remplacer le silicium dans les futurs appareils à électrons. Les recherches sur l'arséniure de gallium s'orientent vers plusieurs axes. Les plus importants sont: -l'étude des défauts et la visualisation de leurs effets et de leur contribution sur la stabilité du système.

- le dopage avec des éléments de transition pour voir la contribution magnétique et la stabilité ferromagnétique.

Les défauts jouent un rôle important sur les propriétés des semi-conducteurs, et sont souvent utilisé pour expliquer plusieurs effets, tels que la position du niveau de Fermi, la variation de la réactivité chimique de la surface et la diffusion aux surfaces et aux interfaces [34]. De nombreuses études ont été réalisées pour contrôler le comportement des défauts dans les semi-conducteurs, par exemple, l'état de charge des défauts isolés ou groupés, l'influence sur la diffusion. Le processus de diffusion dépend de la température, de la position du niveau de Fermi, du potentiel chimique ou de la pression du système. Malgré ces progrès, beaucoup reste inconnu sur la structure des défauts.

Concernant le dopage du GaAs avec l'élément de transition, c'est surtout le dopage au Mn et Cr qui sont les plus étudiés. La grande attention a été concentrée sur cette importante classe de matériel. Ils ont ouvert la possibilité d'ajouter du magnétisme à ce matériau[35]

Notre objectif dans ce mémoire est d'étudier le comportement de différents défauts ponctuels dans le GaAs. En particulier, nous voulons confirmer les résultats du dopage de GaAs avec des impuretés et étudier les effets des éléments de transition sur leurs propriétés électroniques et magnétiques afin de rechercher de nouvelles phases ferromagnétiques possibles dans les DMS basés sur III – V.

À ces fins, nous effectuons des calculs de structure électronique ab initio, et nous utilisons la méthode basée sur

II-2 Méthode de calculs :

Les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de $\text{Ga}_{1-x}\text{TM}_x\text{As}$ (TM = Mn, Cr) sont effectués par des calculs de Premiers principes basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en utilisant la Méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k [36] Nous avons utilisé : *l'approximation du gradient généralisé (GGA* [37] pour déterminer le potentiel d'échange et corrélation

Pour atteindre la convergence des valeurs propres énergétiques, les fonctions d'onde dans la région interstitielle ont été étendues en ondes planes avec un $k_{\text{max}} = 8 / \text{RMT}$ (RMT est le rayon moyen des sphères muffin-tin et le K_{max} est la valeur maximum du vecteur d'onde). Les valeurs RMT pour GaAs sont supposées être 1,74 et 1,62 a.u. pour Ga et As, respectivement. Le GaAs a une structure de Zinc blende avec le groupe spatial F-43m dans lequel l'atome de Ga est situé à (0, 0, 0) et l'atome de As à (0,25, 0,25, 0,25).

Lorsque TM est dopé avec une concentration $x = 0,25$, les calculs sont effectués avec une super cellule à huit atomes. Dans la super cellule à huit atomes, nous remplaçons un atome de As (0,25, 0,25, 0,25) par TM. Pour $x = 0,5$, nous remplaçons deux atomes de As par TM.

Nous avons utilisé 500 points pour la structure ZB. Dans nos calculs le procédé d'itérations est répété jusqu'à ce que le calcul de l'énergie converge pour moins de 10^{-4} Ryd.

II-3 Résultats et discussions :

Une question importante est de savoir comment les propriétés électroniques structurales et magnétiques des alliages semi-conducteurs changent en fonction de la composition x . Afin d'étudier ces propriétés des alliages ternaires $\text{Ga}_{1-x}\text{TM}_x\text{As}$ pour des concentrations $x = 0, 0,25$, nous calculons d'abord les propriétés structurelles du composé binaire GaAs. Pour toute concentration de $\text{Ga}_{1-x}\text{TM}_x\text{As}$, l'optimisation structurale est effectuée en minimisant l'énergie totale par rapport au volume unitaire de cellules en utilisant l'équation d'état de Murnaghan [38]

II-4 Propriétés structurales :

Les propriétés structurales du GaAs ont été étudiées dans la phase blende de zinc. Les calculs sont effectués en utilisant l'approximations GGA. La Figure II.1 représente la courbe de variations de l'énergie totale du composé binaire GaAs en fonction de volume dans la phase zinc- blende, calculées en utilisant l'approximations GGA.

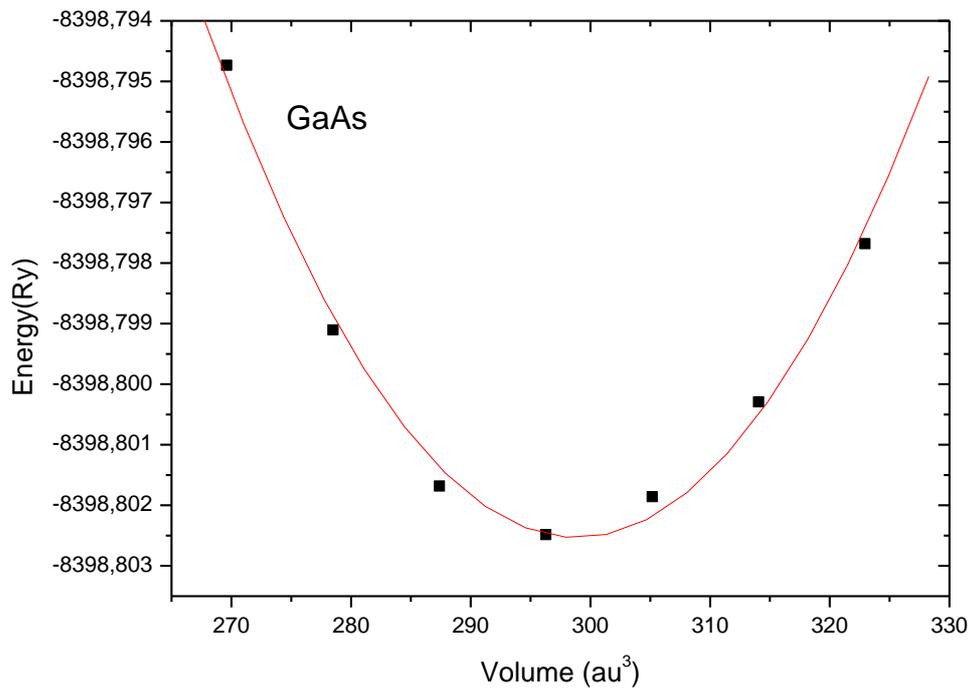


Figure II.1: Variation de l'énergie totale en fonction du volume du binaire GaAs dans la phase zinc-blende dans l'approximations GGA.

L'ensemble des résultats de l'état fondamental du composé GaAs obtenues par la GGA tel que le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa dérivée sont rassemblés dans le Tableau 1, comparés à d'autres valeurs expérimentales et théoriques.

Par ailleurs, nous remarquons la bonne concordance de nos résultats avec les résultats expérimentaux et théoriques de la littérature. Nos calculs donnent un paramètre de maille d'équilibre de **5.6044 Å** pour la GGA

Tableau II.1 : Valeurs du Paramètre du réseau a (Å), du module de compression B (GPa), de sa dérivée B' et de l'énergie totale minimale E_{min} (Ry) du GaAs dans phase zinc-blende, calculées par la GGA.

Composé		a (Å)	B (GPa)	B'	E_{min} (RY)	E_g
GaAs	Notre calcul	5.6044	73.4096	5.2423	-8398.802455	0.9244
	Autre calcul	5.710 [45]				0.912[45]
	calcul	5.58 [39]				1.42 [46]
	Exp	5.653 [44]				

II-4-1 Propriétés électroniques de GaAs :

En physique du solide, la théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergies possibles en fonction du vecteur d'onde caractérisant les électrons d'un solide. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles, séparées par des "bandes" d'énergie interdites. Cette modélisation conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure de bandes. 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 considérées.

La courbe de bande d'énergie du GaAs, calculées le long des lignes de haute symétrie de la première zone de Brillouin irréductible en utilisant la GGA est présentée sur la figure 2. La structure de bande du GaAs obtenues par l'utilisation de la GGA, a des allures très similaires avec un léger déplacement de quelques bandes. Nous pouvons aussi dire que pour la figure 2, la bande de valence présente moins de dispersion que les bandes de conduction. Ceci est dû au fait que les électrons dans la bande de conduction sont plus libres et, par conséquent, moins localisés. 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.

Pour le composé étudié GaAs, on remarque que le maximum de la bande de valence (VBM) est situé au point Γ , tandis que le minimum de la bande de conduction (CBM) est situé au point Γ , ce qui veut à dire qu'il appartient aux semiconducteurs à gap directe.

Les valeurs du gap d'énergie que nous avons trouvé sont données dans le Tableau 1 ; elles sont en bon accord avec les valeurs théoriques; mais pas avec les valeurs expérimentales.

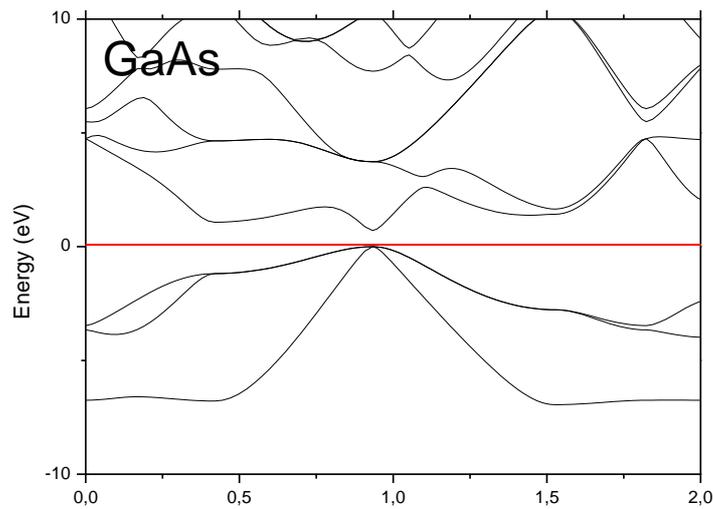


Figure II.2 la structure de bande : GaAs

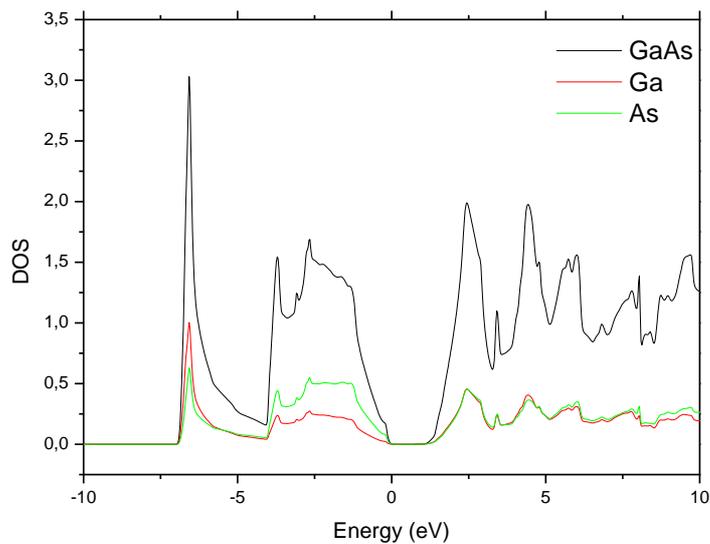


Figure II. 3 : La Dos totale et partielle de GaAs

II-5 Étude des propriétés des alliages ternaires GaMn_xAs_{1-x} :

Le GaAs dopé au Cobalt et manganèse est un des systèmes les plus étudiés parmi les DMS à base de GaAs dans la littérature, non seulement en raison de la solubilité élevée du Co et Mn dans les films GaAs, mais aussi à cause de son moment magnétique élevé à température ambiante.

II-5-1 Les propriétés structurales :

L'objectif de cette section est de savoir comment les propriétés électroniques structurales des alliages semi-conducteurs changent en fonction de la composition x du ternaire GaMn _{x} As _{$1-x$} .

et GaCr_xAs_{1-x} avec (x=0.25, 05 et 0.75). L'optimisation structurale est effectuée par minimisation de l'énergie totale par rapport au volume de la cellule unitaire en utilisant l'équation de Murnaghan [40]. Le paramètre du réseau a, module de compressibilité (B), la dérivée du module de compressibilité (B'), pour différentes concentrations sont résumés dans le **Tableau II.2**. Il est bien connu que les paramètres structuraux varient en fonction de la composition dans les alliages semi-conducteurs classiques, la variation du paramètre de maille suit la loi de Vegard,

Tableau II.2 : Le paramètre du réseau a, module de compressibilité(B), la dérivée module de compressibilité (B') du GaTM_xAs_{1-x} (TM= Mn, Cr)

Composé	a(A)	B(GPa)	B'	E _{min} (RY)
GaCr0.25As0.75	5.8325	47.9528	4.5691	-31221.1412
GaCr0.50As0.50	5.90549324	41.7966	2.5816	-28800.536468
Gacr0.75As0.25	5.8563	39.1508	2.3477	-26379.888744
GaMn0.25As0.75	5.7991	47.7184	3.8700	-31436.720185
GaMn0.5As0.5	5.8704	48.7084	9.2783	-29231.671155

II-5-2 Les propriétés électroniques :

Pour les DMS (diluted magnetic semiconductor), l'introduction d'une impureté magnétique donne naissance à des interactions magnétiques ce qui modifie la structure de bande et la densité d'états du semiconducteur [41] [42]. Pour les systèmes magnétiques, les calculs à spins polarisés sont effectués en utilisant le concept des électrons à spin-up et spin-down séparément.

Les structures de bandes d'énergie électroniques dépendantes du spin polarisé, calculées pour les composés ferromagnétiques GaMn_{0,25}As_{0,75} et GaCr_{0,25}As_{0,75} en utilisant les constantes de réseau prédites à l'équilibre le long des directions de plus haute symétrie dans la zone de Brillouin, sont présentées sur les Figures 4 et 5 respectivement.

Le profil global des bandes montre les mêmes traits caractéristiques pour les différents composés étudiés. Il est évident que pour tous les cas, il s'agit d'un grand échange du splitting de spin entre les états majoritaires de spin (spin up) et minoritaires de spin (spin down) à travers le niveau de Fermi, ce qui explique que l'ajout de l'atome de Cr ou Mn peut ordonner le magnétisme dans le GaAs hôte. Le spin majoritaire préserve le comportement semiconducteur, tandis que le spin minoritaire excrète le niveau de Fermi et donne des propriétés métalliques.

Nous pouvons également observer que le haut de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au niveau du point Γ de la zone de Brillouin, indiquant une bande interdite directe de ces composés tel que c'est le cas pour le GaAs pur.

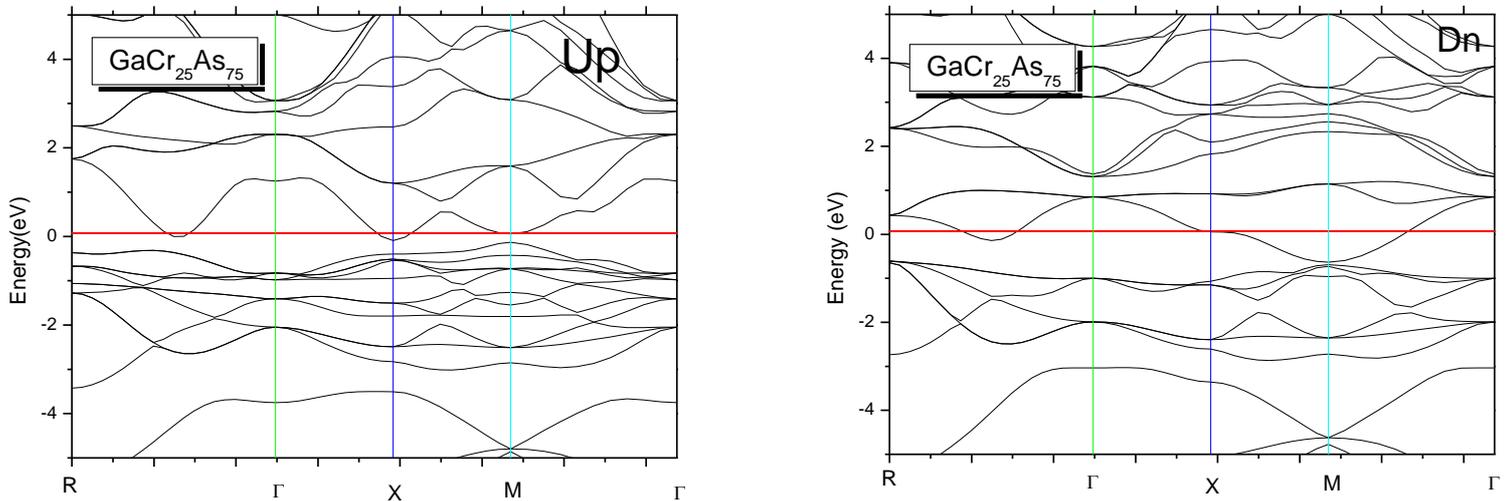


Figure II. 4: La structure de bande pour la majorité spin et minorité spin pour les composé $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$

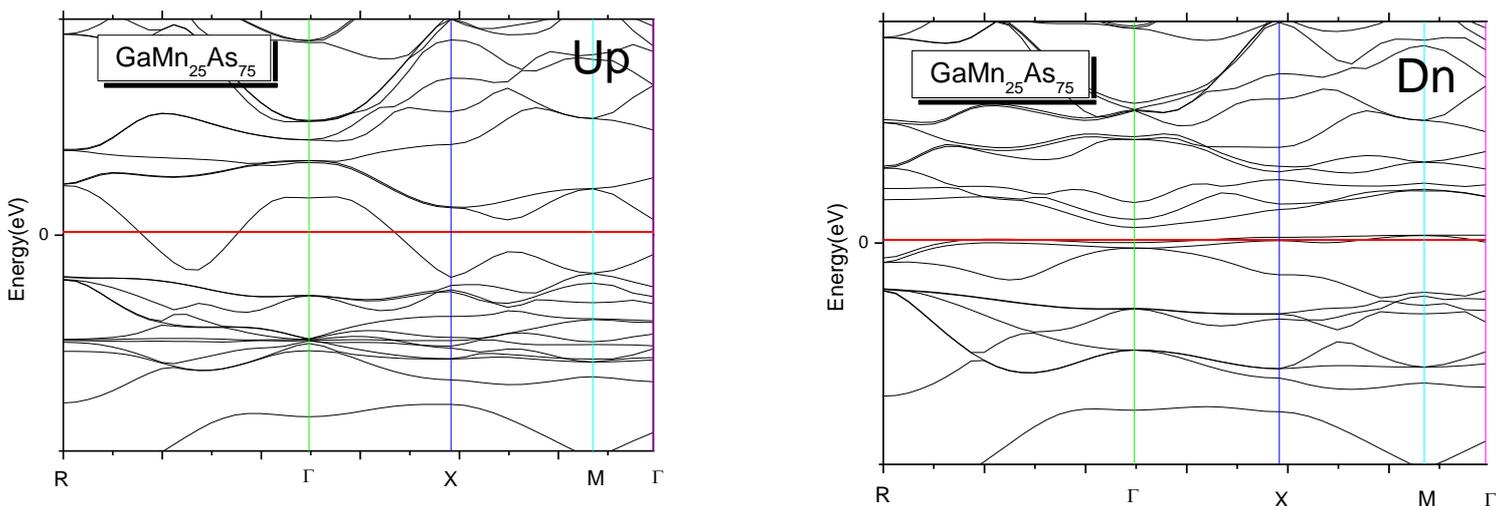


Figure II. 5 : La structure de bande pour la majorité spin et minorité spin pour les composé $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$

-II-5-3 propriétés magnétiques :

Dans le tableau 2, nous montrons le résultat des calculs effectués avec la méthode théorique que nous avons adoptée. Le moment magnétique total de la maille élémentaire, pour les alliages $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ est décomposé dans les contributions des sphères atomiques de Ga, As, TM et de la région interstitielle pour chaque moment angulaire. La magnétisation totale de la cellule est de $5 \mu\text{B}$ pour $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$, les moments magnétiques à l'intérieur des sphères atomiques sont $3,81 \mu\text{B}$ pour Cr, $0,034$ pour Ga et $0,040$

pour As dans la région interstitielle. Pour $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$, le moment magnétique est de $4 \mu\text{B}$ on peut voir dans le tableau II.3 que les moments magnétiques totaux de tous les composés provient principalement de l'atome TM, et les contributions de Ga, As et de l'interstitiel sont très petit.

Tableau II.3 : Le moment magnétique de $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$.

Composé	M_{Total}	M_{Ga}	M_{TM}	M_{As}	M_{Inter}
$\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$	5.00441	0.03477	3.81153	0.04041	0.93256
$\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$	4.00				
	4.00 [43]				

II-6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de $\text{GaTM}_x\text{As}_{1-x}$ (TM = Cr, Mn) avec une concentration de 25% de TM. Les résultats des bandes d'énergies présentées dans cette étude identifient que $\text{GaTM}_x\text{As}_{1-x}$ (TM = Cr, Mn) présentent un caractère semi-métalliques. Les moments magnétiques totaux dans tous les alliages proviennent principalement de l'atome TM et les contributions de Ga et As sont les plus faibles.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail, qui revêt un caractère théorique, a comme objectif la prédiction d'un nouveau matériau pour des applications dans le domaine de la spintronique. Pour ce faire, nous avons orienté les recherches pour apporter une contribution à la compréhension des semi-conducteurs magnétiques dilués à base de l'Arsonic de galium GaAs, semi-conducteur très connu pour ses applications dans plusieurs domaines, notamment le domaine de l'optoélectronique.

Nous avons étudié dans un premier temps les propriétés structurales et électroniques du GaAs pur ; en utilisant l'approximation GGA. Ceci a permis de valider les paramètres de calcul choisis et de confirmer la bonne description du système.

Le paramètre de maille à l'équilibre et le module de compressibilité obtenus sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et d'autres valeurs théoriques.

Ensuite, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques du GaAs dopé au Manganèse (Mn) et au Chrome (Cr). Les propriétés structurales d'équilibre des composés tels que le paramètre de maille, le module de compressibilité et son dérivé premier sont déterminées en optimisant l'énergie totale du composé. Les courbes de bandes d'énergie électroniques dépendant du spin polarisé ont été calculées pour les composés ferromagnétiques $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ le long des directions de plus haute symétrie dans la zone de Brillouin en utilisant les constantes de réseau prédites à l'équilibre. Les courbes calculées ont permis de mettre en évidence le caractère demi-métallique ferromagnétique dans les composés ce qui suggère une forte polarisation de spins.

La valeur du moment magnétique total calculé est égal à 4 μB et 3 μB pour $\text{GaMn}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ et $\text{GaCr}_{0.25}\text{As}_{0.75}$ respectivement ; elle est liée principalement aux atomes TM (Mn et Cr), ce qui confirme la demi-métallicité ferromagnétique des deux composés.

Références bibliographique

Références bibliographique

- [1] H. Ohno, Science 281 (1998) 951.
- [2] K. Ueda, H. Tabata, T. Kawai, Appl. Phys. Lett. 79 (2001)988.
- [3] S. Sonoda, et al.,cond-mat/0108159.
- [4] S.J. Potashnik, et al.,Appl. Phys. Lett. 79 (2001) 1495.
- [5] K.M. Yu, et al., Phys. Rev. B 65 (2002) 201,303(R)
- [6]électrons sur les propriétés optiques et de transport électrique du GaAs", (M. Sc), Université de Sherbrooke, (juillet 1993)
- [7] M. Spiesser, Jan Czochralski et la méthode du tirage des cristaux. Bulletin GFCC (Mai 1999).
- [08] J Gaj, R RGatazka, and M Nawrocki. « Giant exciton faraday rotation in Cd_{1-x}MnxTe mixed crystals ». Solid State Communcations, (1978), 25:193–195.
- [09] Rudolf Schäfer and Alex Hubert. « A new magnetoopticeffectrelated to non-uniformmagnetization on the surface of a ferromagnet ». Phys. Stat. Sol. (a), (1990), 118(1):271–288.
- [10] F. Baboux, F. Perez, C. a. Ullrich, I. D’Amico, J. Gómez, and M. Bernard. « Giant collective spin-orbitfield in a quantum well: Fine structure of spin plasmons ». PhysicalReviewLetters, (2012), 109(16):166401.
- [11] G. Karczewski, J. Jaroszyński, A. Barcz, M. Kutrowski, T. Wojtowicz, and J. Kossut, « High mobility 2D electrongas in iodine modulation dopedCdTe/CdMgTeheterostructures ». Journal of Crystal Growth, (1998) 184-185:814-817.
- [12] A. Haury, A. Wasiela, A. Arnoult, J. Cibert, T. Dietl, Y.M. D’aubigne, S. Tatarenko, « Observation of ferromagnetic transition induced by twodimensionnalholegas in modulation dopedCdMnTe quantum wells ». Phys. Rev. Lett. 79 (1997), 511-514.
- [13] D. Ferrand, J. Cibert, A. Wasiela, C. Bourgonon, S. Tatarenko, G. Fishman, T. Andrearczyk, J. Jaroszynski, T. Dietl, B. Barbara, D. Dufeu, « Carrier-inducedferromagnetism in p-Zn_{1-x}MnxTe ». Phys. Rev. B 63 (2001), 085201-085213.
- [14] D. Soundararajan, D.Mangalaraj, D.Nataraj, L.Dorosinskii, J.Santoyo-Salazar, M.J.Riley, « Magneticandmagneto-opticalstudies on Zn_{1-x}Cr_xTe (x =0.05) films grown on glass substrate ». J. Magn. Magn. Mater. 321 (2009) 4108-4114.

Références bibliographique

- [15] Yu-hong Huang, Wan-qi Jie, Gang-qiang Zha « First principle study on the electronic and magnetic properties in $Zn_{0.75}Cr_{0.25}M$ ($M=S, Se, Te$) semiconductors ». *J. Alloys. Compd.* 539 (2012), 271-275.
- [16] D. DeSimone, C. E C Wood, and C. A. Evans, « Manganese incorporation behavior in molecular beam epitaxial gallium arsenide ». *Journal of Applied Physics*, (1982) 53(7):4938-4942.
- [17] H. Munekata, H. Ohno, S. Von Molnar, Armin Segmüller, L. L. Chang, and L. Esaki, « Diluted magnetic III-V semiconductors ». *Physical Review Letters*, 63(17):1849–1852, 1989.
- [18] H Ohno, A Shen, F Matsukura, A Oiwa, a Endo, S Katsumoto, and Y Iye, « (Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs ». *Appl. Phys. Lett.*, (1996) 69(3):363–365.
- [19] M. Wang, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher, a. W. Rushforth, O. Makarovsky, a. Patané, R. P. Campion, C. T. Foxon, V. Novak, and T. Jungwirth, « High Curie temperatures at low compensation in the ferromagnetic semiconductor (Ga,Mn)As ». *Physical Review B*, (2013), 87(12):121301(R).
- [20] J. Masek, J. Kudrnovsky, F. Maca, B. L. Gallagher, R. P. Campion, D. H. Gregory, and T. Jungwirth, « Dilute Moment n-Type Ferromagnetic Semiconductor $Li(Zn,Mn)As$ ». *Physical Review Letters* 98, (2007) 067202.
- [21] M.N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Vandau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet A. Friederich, J. Chazelas, « Giant magnetoresistance of (001) $Fe/(001)Cr$ magnetic superlattices ». *Phys. Rev. Lett.* 61 21 (1988), 2472-2475.
- [22] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, « Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange ». *Phys. Rev. B* 39 7 (1989), 4828-4830.
- [23] Maria marins de castrosuza, « Commutation précessionnelle de mémoire magnétique avec polariseur à anisotropie perpendiculaire ». Thèse de doctorat, Université de Grenoble (2011).
- [24] Sébastien Bandiera. « Jonctions tunnel magnétiques à anisotropie perpendiculaire et écriture assistée thermiquement ». Thèse de doctorat. Université de grenoble (2006).
- [25] S.Das Sarma, « Spintronique ». *American Scientist*, (2011) 89, 516.
- [26] François Cardarelli, *Materials Handbook : A Concise Desktop Reference*, Springer Verlag, 2008, 2e éd., 1340.

Références bibliographique

- [27] W.J. Gallagher and S. P. P. Parkin, « Development of the magnetic tunnel junction MRAM at IBM: From. rstjunctions to a 16-Mb MRAM demonstrator chip ». IBMJ. Res. &Dev. 50 (2006), 1-5.
- [28] D. d. awschaom and j. kikkawa, « Electron spin and opticalcoherence in semiconductors ». PhysicsToday, 33, (1999).
- [29] D. d. awshalom and n. sarmath, « Optical manipulation, transport and storage of spin coherence in semiconductors ». Springer, (2002), 147.
- [30] S. Datta, B. Das, « Electronic analog of the electro-optic modulator ». App. Phys. Lett, 56 (1990), 665-667.
- [31] Djelloul-Berkane Lalia, « Transport de spin dans les nanomatériaux : Application à la spintronique ». Thèse de Magistère. Université Hassiba Benbouali - Chlef (2008).
- [32]. Ruterana, P., Albrecht, M., Neugebauer, J.: Nitride Semiconductors, Handbook on Materials and Devices. WILEY-VCH, Weinheim (2003).
- [33]. Riane, R.: Solid State Sci. 11, 200–206 (2009).
- [34]. P Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, Wien2k, an Augmented Plane Wave Plus Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria (2001).
- [35]. J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett., 77, 3865 (1996).
- [36]. Muranghan, F.D.: Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30, 244 (1944).
- [37]. 26:515–525, B. Doumi · A. Tadjer · F. Dahmane · D. Mesri · J Supercond Nov Magn (2013).
- [38]. 10.1007/s10948-013-2350-x, F. Dahmane · A. Tadjer · B. Doumi · D. Mesri · J Supercond DOI..., ,
- [39] . M. Othman, E. Kasap, and N. Korozlu, J. Alloys. Compd. 496, 230 (2010).
- [40]. Yu. Uspenskii, E. Kulatov, H. Mariette, H. Nakayama, H. Ohta, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 258–259 (2003) 248–250.
41. Magn Hohenberg, P., Kohn, W.: Phys. Rev. B 136, 864 (1964).
42. Kohn Nov, W., Sham, L.J.: Phys. Rev. A 140, 1133 (1965).
43. Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G.K.H., Kvasnicka, D., Luitz, J.:
- [44] K. Nakamura, T. Hashimoto, T. Yasui, M. Yoshimoto, and H. Matsunami, J. Appl. Phys. 40, 1377 (2001)
- [45] R. MOUSSA A. ABDICHE B. ABBAR M. GUEMOU R. RIANE G. MURTAZA SAAD BIN OMRAN R. KHENATA and F. SOYAL Journal of ELECTRONIC MATERIALS, Vol. 44, No. 12, 2015

Références bibliographique

[46] D.S. Jiang, L.F. Bian, X.G. Liang, K. Chang, B.Q. Sun, S. Johnson, and Y.H. Zhang, *J. Cryst. Growth* 268, 339 (2004).