RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ YAHIA FARES MÉDÉA
FACULTÉ DES SCIENCES



MÉMOIRE

présenté pour l'obtention du diplôme de Master

EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique des matériaux

Par

BENAISTI ILHEM

BOURELAF AMINA

Thème :

Effet des contraintes d'épitaxie sur la division des bandes des trous dans un semi-conducteur magnétique dilué à base de GaMnAs/InGaAs/GaAs

Soutenue publiquement le 10 Juin 2017, devant le jury composé de :

Dr. GUECHI.N	Maître de Conférences	Université de Médéa	Président
Dr. BOUKAOUD.A	Maître de Conférences	Université de Médéa	Examinateur
Mr. SEBBAR.D	Maître Assistant	Université de Médéa	Examinateur
Dr. DEHBAOUI.M	Maître de Conférences	Université de Médéa	Encadreur

ANNÉE UNIVERSITAIRE 2016/2017

ملخص

حققت اقتران الخصائص المغناطيسية وأشباه النواقل الى وجود تقنية جديدة التي تستغل الإلكترونيات الدورانية هذه التقنية تسعى الى التصغير من المكونات وزيادة أداء الأجهزة الإلكترونية. وفي هذا السياق، يتم دراسة مواد جديدة :أشباه النواقل المغناطيسية المخففة (DMS)، وبنية نطاق إلكتروني التي لها دور أساسي في خصائصها المغناطيسية. وكان الهدف من هذه الدراسة إلى التعرف على تأثير تنضيد الضغوط على تقسيم فرق من الثقوب الثقيلة والثقوب الخفيفة، وكذلك دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية ل GaMnAs/InGaAs و التي لديها مصلحة التكنولوجية بشكل خاص في تطبيقات الإلكترونيات الدورانية. وقد أجريت هذه الدراسة من خلال استخدامنا لطريقة المدارات الخطية (muffin-tin)مع طريقة (FP - LMTO) التي تصنف في مجال النظرية الدالية الكثافية(DFT).

الكلمات الرئيسية

الإلكترونيات الدورانية، أشباه النواقل المغناطيسية المخففة، تنضيد الضغوط، مجموعات من الثقوب الثقيلة والثقوب الخفيفة، النظرية الدالية الكثافية.

RÉSUMÉ

Le couplage des propriétés ferromagnétiques et semi-conductrices a permis de réaliser des nouvelles technologies qui exploitent le spin des électrons, c'est la spintronique ; le domaine qui cherche à miniaturiser des composants et à augmenter la performance des dispositifs électroniques. Dans ce cadre, de nouveaux matériaux sont étudiés dont les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS), où la structure de bande électronique a un rôle primordial sur leurs propriétés magnétiques.

L'objectif de ce travail est d'étudier l'effet des contraintes d'épitaxie sur la division des bandes des trous lourds et des trous légers, et aussi les propriétés structurales, électroniques, et magnétiques d'un matériau qui a un intérêt technologique bien particulier dans les applications de la spintronique, le $GaMnAs/InGaAs/GaAs$. Cette étude est réalisée par la méthode des orbitales muffin-tin linéarisées avec un potentiel total ($FP-LMTO$) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, pour déterminer le potentiel d'échange-corrélation.

Mots clés

Spintronique, semi-conducteur magnétique dilué, contrainte d'épitaxie, les bandes des trous lourds et des trous légers, la théorie de la densité fonctionnelle.

ABSTRACT

The coupling of ferromagnetic and semiconductor properties has achieved new technologies that exploit the spin of electrons, spintronics ; the field that seeks the miniaturization of components and increase the performance of electronic devices. In this context, new materials are studied with dilute magnetic semiconductors (DMS), where the electronic band structure has a crucial role on the magnetic properties.

The objective of this work was to study the effect of epitaxial strains on the division of the bands of heavy holes and light holes, as well as the structural, electronic, and magnetic properties of diluted magnetic semiconductor materials $GaMnAs/InGaAs/GaAs$ which has a particular technological interest in the applications of spintronics. This study is carried out by the method of the full potential linearized muffin−tin orbitals ($FP-LMTO$) in the framework of the functional theory of density (DFT), to determine the potential for exchange-correlate.

Keywords Spintronics, diluted magnetic semiconductor, epitaxy strain, the bands of the heavy holes and the light holes, density functional theory.

Remerciements

Nous souhaitons remercier avant tout notre promoteur, *Dr.DEHBAOUI Mourad* qui a permis la réalisation de ce mémoire dans les meilleures conditions, et qui a été pour nous le modèle d'accomplissement personnel et professionnel. Nous saluons sa compétence, sa patience et ses judicieux conseils. nous avons énormément appris de lui, dont l'intuition scientifique et le sens de la direction ont su orienter notre travail.

Nous tenons à exprimer nos sincères remerciements aux membres du jury de cette thèse : Monsieur *GUECHI.N* qui a accepté de présider le jury de ce mémoire, nous le remercions vivement ; Monsieur *BOUKAOUD.A* et Monsieur *SEBBAR.D* qui nous ont fait l'honneur d'examiner ce travail.

Nous adressons nos profonds remerciements aussi à Monsieur *BENREKIA.A*, Monsieur *HAOUATIS.D* et Monsieur *HOUHOU.O*, pour nous avoir accueillie, et qui ont fait d'une aide précieuse dans notre recherche.

Nous exprimons aussi notre reconnaissance particulière à l'ingénieur du laboratoire d'informatique Madame *LOUZE Khadija* pour sa gentillesse et sa disponibilité.

Nous remercions vivement nos parents nos proches et nos amis qui nous ont soutenu pendant cette période. Sans leurs encouragements et leur présence affective, nous n'aurons pu mener à bien ce modeste travail.

DÉDICACE

À mes parents, qui par leur soutien moral et matériel et leur sacrifice, m'ont permis a atteindre les études supérieures.
À mes sœurs et mes frère, à toute ma famille.
Je dédie ce mémoire à toutes les personnes qui m'ont enseignées le savoir durant toute ma scolarité, qui m'ont conseillées cette spécialité, ainsi que ceux qui m'ont aidées à élaborer ce travail.
À mes aimables amies, à ma camarade qui m'a accompagnée dans ce travail en tant que binôme, et sa dont je remercie sa sociabilité.

AMINA

Je voudrais témoigner toute mes reconnaissances à toutes les personnes qui grâce à leur contribution nous pouvons réaliser ce mémoire.
À ma mère et à mon père ;
À notre promoteur ;
À mon binôme ;
À mes frères ;
À toute ma famille et tous mes amis ;
À tous les professeurs et enseignants qui ont collaboré à ma formation depuis mon premier cycle d'étude.

ILHEM

NOTATIONS ET ABRÉVIATIONS

Abréviations les plus couramment utilisées :

AFM	: Antiferromagnétique (Antiferromagnetic).
ASA	: Approximation de la sphère atomique (Atomic sphere approximation).
B_0	: Module de compressibilité (Bulk modulus).
B_0'	: La dérivée du module de compressibilité par rapport à la pression.
B_c	: Bande de conduction (Conduction band).
B_v	: Bande de valence (Valence band).
BZ	: Zone de Brillouin (Brillouin zone).
DFT	: Théorie de la fonctionnelle de la densité (Density functional theory).
DMS	: Semi-conducteurs magnétiques dilué (Diluted magnetic semiconductors).
DOS	: Diagramme de densités d'états (Density of states).
E_F	: Energie de Fermi (Fermi energy).
FM	: Ferromagnétique (ferromagnetic).
$FP-LMTO$	: Orbitales Muffin Tin linéarisées avec un potentiel total (Full potential Linearized Muffin Tin orbital).
$GaAs$	: Arséniure de Gallium.
$GaMnAs$	: Gallium Manganese Arsenide.
GGA	: Introduction d'un gradient a l'approximation LDA (Generalized gradient approximation) .
$InAs$	: Arséniure d'Indium.
$InGaAs$	: Indium Gallium Arsenide.
LDA	: Approximation de la densité locale (Local density approximation).
$LMTO$	: Orbitales Muffin Tin linéarisées (Linearized Muffin Tin orbital) .
$LSDA$	: Approximation de la densité locale des spins (Local spin density approximation).
$MnAs$	: Arséniure de Manganèse.
MTA	: Approximation de Muffin Tin (Muffin Tin Approximation).
$PLW-LMTO$	: Orbitales Muffin Tin linéarisées avec des ondes planes (Plane Waves Linear Muffin Tin Orbitals).
$RKKY$	: Couplage Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida.

Les constantes physiques :

La charge de l'électron	$e = 1.60219 \times 10^{-19}\ C$
La constante de Planck	$h = 6,626070040 \times 10^{-34}\ J.s$
La constante de Planck réduite	$\hbar = 1,054571800 \times 10^{-34}\ J.s$
La masse de l'électron	$m_e = 9,10938356 \times 10^{-31}\ kg$
La masse de proton	$m_p = 1,672621898 \times 10^{-27}\ kg$
La masse de neutron	$m_n = 1,674927471 \times 10^{-27}\ kg$
Le rayon de Bohr	$a_0 = 0.52917725$ Å

Unité de conversion :

$1\ eV$	$= 1.60218 \times 10^{-19}$ J.	
$1\ Ry$	$= 13.6057 eV$.	
$1\ a.u$	$= 0.52917725$ Å.	
$1\ Ry/a.u^3$	$= 1.4710516 \times 10^{13}$ Pa	$= 1.4710516 \times 10^{4}$ GPa.
$1\ dyn$	$= 10^{-5} N$.	
$1\ Pa$	$= 10 dyn/cm^2$.	
$1\ Pa$	$= 10^{-5} bar$.	

Table des matières

Résumé ii

Remerciements iv

Dédicace v

Notations et abréviations vi

Liste des Figures xi

Liste des Tableaux xiii

Introduction générale 1

1 Spintronique et semi-conducteurs magnétiques dilués 3
- 1.1 Introduction . . . 3
- 1.2 Les concepts de base de la spintronique : . . . 4
- 1.3 Les applications de la spintronique . . . 5
  - 1.3.1 La Magnétorésistance géante (GMR) . . . 5
  - 1.3.2 La jonction tunnel magnétique (MTJ) . . . 6
- 1.4 Les dispositifs de la spintronique . . . 7
  - 1.4.1 Les têtes de lecture de disque dur . . . 7
  - 1.4.2 Les mémoires magnétiques . . . 8
- 1.5 Spintronique à base de semi-conducteurs : . . . 9
- 1.6 Les Semi-conducteurs Magnétiques . . . 9
- 1.7 Les interactions magnétiques : . . . 12
  - 1.7.1 Interactions entre porteurs délocalisés et ions de manganèse . . . 12
  - 1.7.2 Interactions entre ions de manganèse . . . 13
  - 1.7.3 Modèle de Zener . . . 14
  - 1.7.4 Modèle de polarons magnétiques . . . 14
- 1.8 Anisotropie magnétique . . . 15
  - 1.8.1 Anisotropie magnétocristalline . . . 16
  - 1.8.2 Anisotropie de forme . . . 16
  - 1.8.3 Anisotropie magnétoélastique . . . 17
- 1.9 Le GaMnAs un semi-conducteur magnétique dilué . . . 17
  - 1.9.1 Origine de ferromagnétisme dans GaMnAs : . . . 18
  - 1.9.2 Anisotropie magnétique de GaMnAs . . . 18

2 Théorie de la Fonctionnelle de la Densité 21

2.1 Introduction . . . 21
2.2 Hamiltonien total du cristal . . . 22
2.3 L'approximation de Born-Oppenheimer . . . 22
2.4 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn . . . 23
2.5 Les équations de Kohn-Sham . . . 24
2.6 Les approximations de la fonctionnelle d'échange-corrélation . . . 26
2.6.1 L'approximation de la densité locale . . . 26
2.6.2 L'approximation de la densité de spin locale . . . 27
2.6.3 L'approximation du gradient généralisé . . . 28
2.7 Approximation sur le potentiel . . . 28
2.7.1 Approximation Muffin-Tin (MT) . . . 28
2.7.2 Approximation des sphères atomiques (ASA) . . . 29
2.7.3 La méthode des orbitales muffin-tin linéarisées . . . 30
2.7.4 Approximation de potentiel complet (Full potential LMTO) . . . 30

3 Résultats et discussions **31**
3.1 Introduction . . . 31
3.2 Méthode de calcul . . . 32
3.3 Propriétés structurales . . . 32
3.3.1 Structure cristalline des composés binaires . . . 32
3.3.2 Structure cristalline des alliages ternaires . . . 35
3.4 Propriétés électroniques et magnétiques . . . 41
3.4.1 Structure des bandes électroniques . . . 41
3.4.2 Paramètre de courbure . . . 43
3.4.2.1 Énergie de Gap . . . 45
3.4.3 Effet de la concentration du Mn sur le gap d'énergie . . . 47
3.4.4 Densité d'état électronique . . . 49
3.5 Effet des contraintes . . . 50
3.5.1 Utilisation des paramètres de la minimisation d'énergie . . . 52
3.5.2 Optimisation par la loi empirique de Sadowski . . . 53
3.5.3 Conclusion . . . 55

Conclusion générale **57**

Bibliographie **58**

Table des figures

1.1 Multicouches de GMR . . . 6
1.2 Structure d'une jonction tunnel magnétique . . . 7
1.3 Principe de l'enregistrement magnétique contenant un système GMR . . . 8
1.4 Charge par induction . . . 9
1.5 Différent types des semi-conducteurs . . . 10
1.6 Les interactions magnétiques . . . 12
1.7 L'anisotropie magnétique . . . 15

2.1 Forme du potentiel Muffin tin. . . . 29
2.2 Forme des sphères atomiques suivant les approximations ASA et Muffin-Tin. . . . 30

3.1 Structure d'une couche en compression et d'une couche en tension. . . . 31
3.2 Minimisation d'énergie des composés binaire par le calcul LDA. . . . 34
3.3 Minimisation d'énergie des composés binaire par le calcul GGA. . . . 34
3.4 Structure cristallographique de $Ga_{1-x}Mn_xAs$. . . . 36
3.5 Minimisation d'énergie du $Ga_{1-x}Mn_xAs$ par le calcul LDA. . . . 37
3.6 Minimisation d'énergie de la couche tampon $In_yGa_{1-y}As$ par le calcul LDA. . . . 37
3.7 Minimisation d'énergie de la couche magnétique $Ga_{1-x}Mn_xAs$ (calcul LSDA). . . . 38
3.8 La variation de paramètre de maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ et $In_yGa_{1-y}As$ en fonction de la concentration de l'impureté. . . . 39
3.9 Structure des bandes de $GaMnAs$ calculé par LDA. . . . 42
3.10 Structure des bandes de $GaMnAs$ calculé par LSDA. . . . 42
3.11 Structure des bandes calculée à la constante de maille d'équilibre. . . . 45
3.12 Structure des bandes calculée à la constante de maille de vegard. . . . 46
3.13 La variation de l'énergie de gap en fonction de la concentration **x**. . . . 48
3.14 La densité d'état des différents composés. . . . 50
3.15 La variation des paramètre calculés en fonction des contraintes exercées pour des concentration de Mn (6%, 25%, 50%, 75%). . . . 55
3.16 La structure des bandes de la couche magnétique $GaMnAs$ en utilisant les différentes substrats. . . . 56

Liste des tableaux

3.1 Propriétés structurales des composés binaires (calcul par LDA) 34
3.2 Propriétés structurales des composés binaires (calcul par GGA) 35
3.3 Propriétés structurales des alliages ternaires (calcul par LDA) 38
3.4 Propriétés structurales de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ calculée par LSDA 39
3.5 L'énergie de gap de $GaMnAs$ pour déférentes concentrations (x) calculées par *LDA* et *LSDA* 43
3.6 L'énergie de gap de Vegard et d'équilibre calculée pour chaque composé. 46
3.7 Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.25}As$ 52
3.8 Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.50}As$ 52
3.9 Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.75}As$ 53
3.10 Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.06}As$ 54

Introduction générale

Les progrès technologiques de la microélectronique et de la physique de la matière dense conduisent à manipuler la matière dont la taille est de l'ordre du nanomètre. La spintronique ou l'électronique de spin est une branche récente de la physique des solides, qui concerne la manipulation de la charge et de spin de l'électron dans les matériaux. Alors que l'électronique classique est basée sur le contrôle des courants de charge, l'électronique de spin traite des courants de spin en exploitant l'influence de spin sur le transport électronique dans les nanostructures magnétiques et non-magnétiques.

Les premières structures étudiées dans ce domaine, utilisent toutes des couches ultra-minces de métaux ferromagnétiques et paramagnétiques. On trouve des multicouches magnétiques de $Fe/Cr/Fe$ dans lesquelles l'effet de magnétorésistance géante (GMR) à été découvert par le groupe d'Albet Fert et Peter Grünberg en 1988 [1], ou encore des structures constituées de jonction tunnel magnétique (TMJ) avec un isolant d'épaisseur nanométrique intercalé entre deux couches ferromagnétiques. Cet effet de magnétorésistance tunnel (TMR) a été découvert avant le GMR par Michel Jullier en 1975 dans des couches de $Fe/MgO/Fe$, mais elle n'a connu un regain d'intérêt qu'après l'observation en 1995 [2] de magnétorésistance tunnel (TMR) à température ambiante dans des jonctions amorphes à base d'alumine [3]. De tels dispositifs sont déjà utilisés au niveau industriel en tant qu'éléments de tête de lecture pour disque dur, ou dans le cas des mémoires magnétiques non volatile (RAM).

Cependant, ces dispositifs à base métallique sont difficile à intégrer dans l'électronique classique. En effet il est nécessaire de fabriquer des structures et des composants hybrides, associant métaux magnétiques et semi-conducteurs, ce qui pose des difficultés à la fois techniques et fondamentales.

Un des défis importants, qui se pose actuellement, est d'arriver à élaborer des semi-conducteurs aussi proches que possible des semi-conducteurs usuels de la micro-électronique, mais présentant en outre des propriétés magnétiques fortement couplées aux propriétés électroniques, ce qui permettrait de conjuguer les avantages de l'électronique de spin et les possibilités de la micro-électronique[4].

Pour atteindre un tel objectif une autre voie pour la spintronique est basée sur la fabrication de semi-conducteurs ferromagnétiques, consistant à introduire des moments magnétiques locaux dans des semi-conducteurs. Le résultat est une nouvelle classe de matériaux maintenant connus sous le nom de semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS). Le semi-conducteur ferromagnétique $GaMnAs$, un matériau prototype des DMS, découvert par le groupe de Ohno à Sendai en 1996 [5], révèle des propriétés très intéressantes.

Une de ses propriétés est l'anisotropie magnétique, pour laquelle la résistivité électrique dépend de l'orientation relative des aimantations. Généralement, l'anisotropie est déterminée par la forme des objets (anisotropie de forme) et par la structure cristalline et des contraintes d'épitaxie (anisotropie magnéto-cristalline).

Ce mémoire est consacré à une étude théorique des couches nanométriques à base de $GaMnAs/InGaAs/GaAs$. Il est organisé en trois principaux chapitres :

- Le premier chapitre est consacré à une présentation des concepts fondamentaux de la spintronique, ses application et les dispositifs utilisés. Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) à base de semi-conducteur (III-V) sont introduit avec une illustration des différentes interactions magnétiques, les différents modèles établis pour expliquer l'apparition de la phase ferromagnétique, et les anisotropies magnétiques.
- Dans le deuxième chapitre, nous proposons de décrire les fondements théoriques de la méthode ab initio sur laquelle repose le code M-studio utilisé pour ce mémoire. Le concept de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui est basée principalement sur les théorèmes d'Hohenberg et Kohn et l'approche de Kohn et Sham est bien décrit dans le chapitre. les potentiels d'échange-corrélation sont traités suivant les approximations (LDA, GGA et $LSDA$).
- Dans le troisième chapitre nous allons présenter et discuter indépendamment : d'une part de l'influence de la variation de la concentration de Mn sur les propriétés structurales, électroniques, et magnétiques de la couche mince magnétique $GaMnAs$. Et d'autre part de l'influence des contraintes d'épitaxie sur la division des bandes des trous lourds et des trous légers du haut de la bande de valence des couches magnétiques de $GaMnAs$.

Chapitre 1

Spintronique et semi-conducteurs magnétiques dilués

1.1 Introduction

En physique des solides, le magnétisme des matériaux est porté par le spin de l'électron, tandis que le transport électrique est causé par le mouvement de la charge d'électron. La spintronique est l'interface entre le magnétisme et l'électronique, leur concept de base est de placer des matériaux ferromagnétiques et non magnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence de spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette idée d'influence de spin des électrons dans la conduction électrique a été suggérée pour la première fois par sir Nevill Mott en 1936, ensuite, à la fin des années 60, elle a été démontrée expérimentalement et décrite théoriquement par des chercheurs européens (à Orsay, Strasbourg, Eindhoven) dans des métaux et alliages ferromagnétiques [1]. Si on arrive à combiner le potentiel des semi-conducteurs avec le potentiel des matériaux magnétiques, il devrait être possible de rassembler des capacités de stockage, de détection, de logique et de communication sur une seule puce qui pourrait remplacer plusieurs composants [6]. Dans le but de cette incorporation, un dopant magnétique (Cr, Mn, Fe, Ni, Co, Gd) est introduit dans un semi-conducteur (GaAs, Si, Ge) au cours de la croissance cristalline, donnant un nouveau matériau dit semi-conducteur magnétique dilué (DMS) dont la particularité est l'apparition de remarquables propriétés magnétiques. Le terme de semi-conducteur magnétique dilué (DMS pour Diluted Magnetic Semiconductor) a été employé à partir des années soixante lorsque ces semi-conducteurs présentaient une phase magnétique (appelée verre de spin). La dénomination "magnétique dilué" provient du fait que ces matériaux sont

dopés seulement à quelques pour cent d'ions magnétiques. Les récents avancements en terme de croissance des DMS ont permis d'obtenir des couches de (Ga,Mn)As d'excellente qualité cristalline et dont la température de Curie atteint pratiquement 200K [7], suscitant alors beaucoup d'intérêts pour ces matériaux en vue d'applications telles que les mémoires magnétiques ou les circuits logiques.

1.2 Les concepts de base de la spintronique :

L'étude des phénomènes de la spintronique s'est depuis étendue à divers types de nanostructures magnétiques qui associent des matériaux ferromagnétiques avec des métaux, des isolants ou des semi-conducteurs. Les propriétés fondamentales de ces nanomatériaux sont étroitement liées à l'échelle des dimensions caractéristiques des échantillons et au mouvement des électrons dans les métaux [8]. Il existe plusieurs échelles de longueur qui caractérisent les propriétés des électrons dans les métaux[9] :

- La composante z de spin S_z prend l'une des deux valeurs $\pm 1/2$ et n'est pas nécessairement conservée, c'est-à-dire dépendante du temps à cause des effets tels que l'interaction spin-orbite (SOI) et les interactions entre électrons. Par conséquent, la longueur pour laquelle le spin d'un électron est conservé est finie. Cette longueur est appelée spin-flip libre parcours moyen et prend généralement des valeurs dans l'intervalle $10^2 nm - 10 \mu m$.
- En raison de la dispersion des électrons, la longueur pour qu'un électron se déplace avec un sens de rotation fixe est beaucoup plus courte que le spin-flip libre parcours moyen. Cette longueur est appelée longueur de diffusion de spin λ_{spin}. Pour trouver le courant polarisé en spin dans les métaux non magnétiques, il est nécessaire que la longueur du système soit beaucoup plus courte que le λ_{spin}.
- Dans les métaux ferromagnétiques, en raison de l'asymétrie entre le nombre des électrons des spins up et des spins down, le courant peut être polarisé en spin. Étant donné que la résistivité électrique est régie par le libre parcours moyen (l), ce qui caractérise le processus de diffusion des électrons, il est nécessaire que $l \ll \lambda_{spin}$ afin que la polarisation de spin du courant soit significative. Lorsque cette condition est satisfaite, la polarisation de spin du courant est bien définie et les électrons de spin up et spin down peuvent être traités indépendamment. C'est ce qu'on appelle le modèle de Mott à deux courants.
- Si on injecte un courant polarisé en spin d'un matériau magnétique vers un matériau non magnétique ou si on extrait un courant polarisé en spin d'un matériau non magnétique vers un matériau

magnétique, il en résulte au voisinage de l'interface une large zone d'accumulation de spin. Le courant polarisé de spin venant du conducteur est progressivement dépolarisé par les renversements de spin générés par l'accumulation de spin.

– Une autre longueur importante est la longueur d'onde de Fermi λ_F, qui caractérise les états électroniques. En général, $l \gg \lambda_F$. Cette échelle de longueur devient importante lorsque des interférences se produisent entre les fonctions d'onde des électrons. La vitesse des électrons sur la surface de Fermi est donnée par la vitesse de Fermi v_F et donc l'échelle de temps pour un électron avec v_F parcourant une distance l, est donnée par τ =l/v_F qui représente le temps de relaxation.

1.3 Les applications de la spintronique

Les applications de la spintronique dépendent largement du phénomène de la magnétorésistance (MR), qui signifie la variation de la conductivité électrique suite à la présence d'un champ magnétique. Les effets de MR dans les matériaux métalliques, semi-conducteurs et isolants ont des caractéristiques différentes [8]. Dans ce cas, de nouveaux phénomènes de transport se produisent ; la magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel (TMR) sont des exemples typiques :

1.3.1 La Magnétorésistance géante (GMR)

L'effet de la magnétorésistance géante est l'aspect typique des phénomènes de la spintronique, il a été découvert dans des multicouches de fer et chrome (Fe/Cr). Il apparait au-dessous d'une longueur d'échelle caractéristique quand l'épaisseur des couches est inférieure au libre parcours moyen des électrons. La GMR est due à l'influence du spin sur la conduction électrique dans un métal ferromagnétique. En effet, elle est observée pour un courant circulant soit perpendiculairement au plan des couches (géométrie CPP pour Current Perpendicular to the Plane) soit dans le plan des couches (géométrie CIP pour Current In Plane) [10]. Dans ces multicouches magnétiques les aimantations sont orientées dans des directions opposées, cependant sous l'effet d'un champ magnétique, le passage d'une configuration antiparallèle (AP) à une configuration parallèle (P) s'accompagne d'une forte baisse de la résistance électrique. En pratique, les effets de GMR en géométrie CIP disparaissent en général pour des épaisseurs individuelles de couches supérieures à environ 10 nm. En géométrie CPP, on observe une amplification de la magnétorésistance par rapport à la géométrie CIP (par un facteur

de 3 ou 4 dans la limite des petites épaisseurs) et surtout une décroissance moins rapide avec l'épaisseur des couches (jusqu'à l'ordre du micron) peut être expliquée par l'effet d'une accumulation de spin [11].

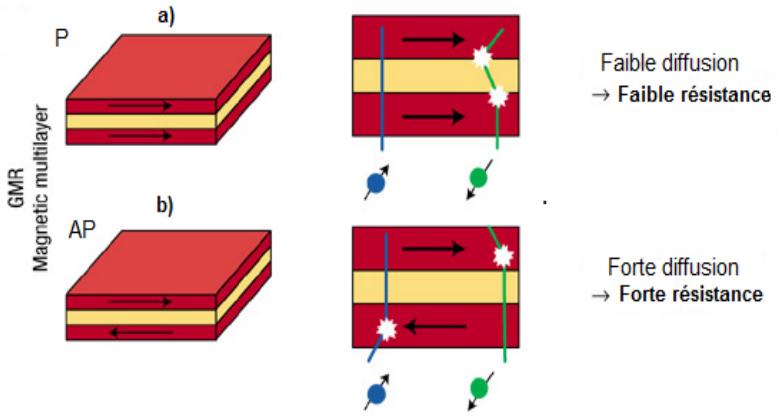


FIGURE 1.1: Structure de multicouche de GMR a) configuration parallèle (faible résistance) b) configuration anti-parallèle (forte résistance) [12].

1.3.2 La jonction tunnel magnétique (MTJ)

Une jonction tunnel magnétique est une hétérostructure formée de deux couches de matériaux ferromagnétiques séparées par une barrière isolante suffisamment fine pour autoriser le transport électronique par effet tunnel perpendiculairement aux couches. La variation de la résistance électrique de la jonction (appelée magnétorésistance tunnel (TMR)), apparaît lors du changement d'orientation relative des aimantations des couches ferromagnétiques [13, 14]. La TMR est un phénomène dans lequel le chevauchement des fonctions d'onde des électrons dans deux couches ferromagnétiques devient faible provocant un faible couplage spin-orbite et une conservation du spin. Comme la conduction dans les métaux ferromagnétiques dépend de la direction de spin, le courant tunnel est proportionnel au produit des densités d'états dans les deux matériaux. Par conséquent, si les aimantations sont dans une configuration antiparallèle, le courant tunnel est donc limité par la densité d'état la plus basse. Par contre, si la configuration est parallèle une forte densité d'états est disponible pour les électrons, le courant est donc plus important[15, 16, 17].

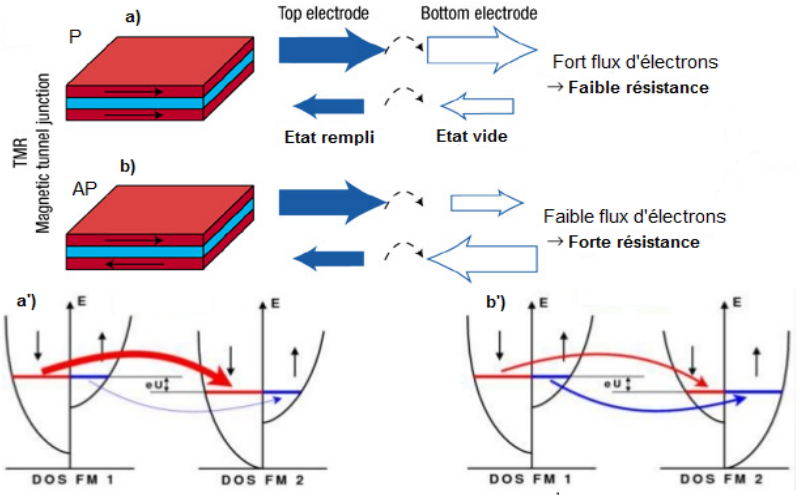


FIGURE 1.2: Structure d'une jonction tunnel magnétique (MTJ)et les densités d'états au niveau de Fermi des deux couches ferromagnétiques a) et a') pour une configuration parallèle b) et b') pour une configuration anti-parallèle [12].

1.4 Les dispositifs de la spintronique

L'intégration des phénomènes de la spintronique dans les dispositifs électroniques a permis de miniaturiser ces dernier et essentiellement d'améliorer le domaine de l'enregistrement magnétique qui se base sur le stockage binaire de l'information en variant l'orientation relative de l'aimantation de deux couches magnétiques en augmentant de plus d'un ordre de grandeur la densité de stockage.

1.4.1 Les têtes de lecture de disque dur

Dans le but de l'amélioration de la sensibilité de la lecture par détection magnétique et la réduction des dimensions des bits magnétiques, l'équipe de V.Speriosu (à IBM Almader) a pu réaliser des capteurs de champs magnétiques ultrasensibles pour les têtes de lecture de disques durs. Ces capteurs utilisent le phénomène de la GMR dans des structures dites "vanne de spin" constituées de deux couches ferromagnétiques découplée, séparée par une couche non magnétique traversée par un courant perpendiculairement au plan des couches[18] .

Pour ces structures l'application d'un faible champ magnétique suffit à provoquer une variation d'orientation relative d'aimantation de la couche libre. Afin de pouvoir passer d'une configuration parallèle à une configuration antiparallèle, on doit avoir deux couches : une dite libre (d'un faible champ coercitif) et l'autre dite piégée (dure, nécessite un champ relativement grand) . En ajoutant une couche antiferromagnétique à l'une des deux couches, on peut bloquer l'aimantation de cette

dernière dans une direction fixe par interaction d'échange à travers l'interface. Le matériau devient alors dur, par contre, l'autre couche ferromagnétique douce reste libre d'où l'application qu'un faible champ magnétique suffit à provoquer une variation d'orientation de l'aimantation.

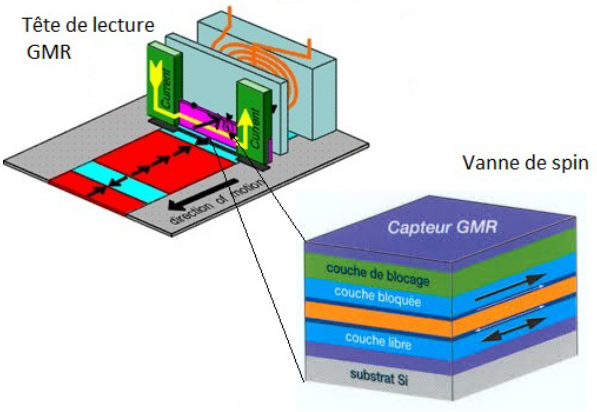


FIGURE 1.3: Principe de l'enregistrement magnétique contenant un système GMR dans une structure de vanne de spin [19].

1.4.2 Les mémoires magnétiques

La jonction tunnel magnétique (Magnetic Tunnel Junctions ou MTJ) est le second type de dispositif de spintronique à des applications importantes. une MRAM composée d'un réseau de MTJs connectées à une matrice de " bit lines " et " word lines " qui permettent l'écriture et la lecture d'une cellule mémoire donnée [20]. Lorsqu'une tension électrique est appliquée entre les deux électrodes de la jonction (voir figure 1.2), le courant s'écoule à travers les couches en rencontrant moins de résistance lorsque les couches magnétiques sont dans une configuration parallèle (état '0'). La résistance est plus importante lorsque les couches sont dans une configuration antiparallèle, (état '1'). Pour assurer le fait que la couche ferromagnétique jouxtant la barrière tunnel du côté opposé à la couche de stockage doit être fixe, c'est-à-dire être indépendante de la température et du champ magnétique externe, on utilise une structure du type barrière tunnel/F/métal/F/AF. La couche antiferromagnétique (AF) piège le premier ferromagnétique (F) par couplage d'échange, la structure est encore renforcée par l'ajout d'une couche métallique qui va induire un couplage de type RKKY antiparallèle entre les deux couches ferromagnétiques puis d'une couche ferromagnétique(F). L'avantage de ce type de mémoires est d'être non volatiles, elles conservent l'information même quand le dispositif n'est pas sous tension. Comme elles sont très intéressantes dans l'électronique nomade car elles ont une grande fiabilité donc un temps d'accès rapide, une densité très élevé et une faible consommation de l'énergie [21, 2, 22, 23, 18].

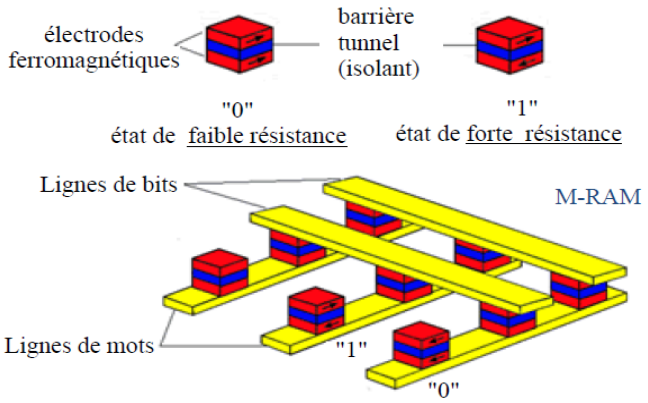


FIGURE 1.4: Structure d'un circuit de MRAM en présentant les états "0" qui correspondent au faible résistance et "1" de forte résistance [19].

1.5 Spintronique à base de semi-conducteurs :

Alors que les dispositifs de filage métalliques décrits précédemment fournissent de nouvelles façons de stocker et de lire des informations dans des disques durs, des bandes magnétiques ou des MRAM, la spintronique à base de semi-conducteurs peut offrir une plus grande richesse de possibilités d'applications. Un semi-conducteur est un bon matériau pour étudier la spintronique [24], car :

- le nombre de porteurs dans un semi-conducteur est relativement faible et leur comportement peut être considéré comme celui d'une seule particule, à l'exclusion de l'effet de nombreuses particules ;
- les qualités des monocristaux semi-conducteurs et des hétéro-structures peuvent être rendues parfaites, en diminuant les défauts du réseau, les impuretés et la relaxation des spins d'électrons ;
- la technologie des dispositifs semi-conducteurs est avancée, il est plus facile de fabriquer ou d'intégrer des périphériques ;
- La distribution aléatoire d'ions magnétiques sur les sous-réseaux de cations dans des matériaux DMS conduit à d'importants nouveaux effets magnétiques, par exemple, un éclatement (splittings) Zeeman de niveaux électroniques, une rotation géante de Faraday, une transition métal-isolant induite par un champ magnétique, et la formation de polarons magnétiques liés.

1.6 Les Semi-conducteurs Magnétiques

Un semi-conducteur devient un semi-conducteur magnétique lorsqu'on y introduit une impureté magnétique (métaux de transitions ou terres rares), qui porte un spin et donc un moment magnétique. Selon la quantité des éléments magnétique introduite les semi-conducteurs magnétiques peuvent

être divisés en deux familles distinctes [25] :

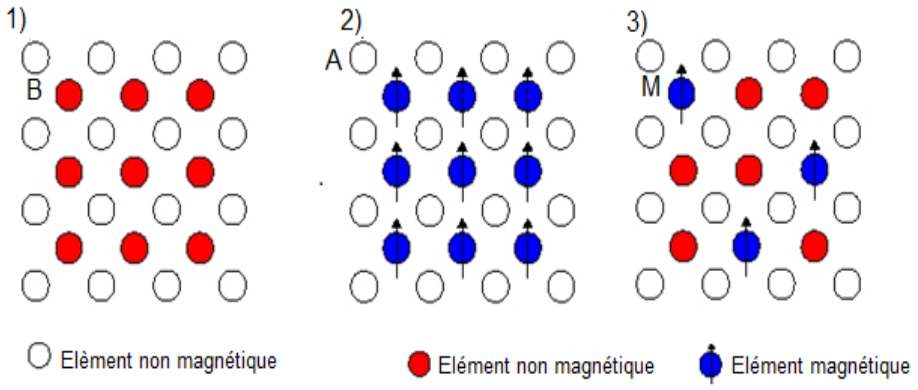


FIGURE 1.5: Différent types des semi-conducteurs 1) semi-conducteur non magnétique, 2) les éléments magnétiques formant un réseau périodique, 3) les éléments magnétiques sont répartis aléatoirement dans le réseau hôte.

1. les semi-conducteurs où les éléments magnétiques forment un réseau périodique : ils sont constitués de matériaux semi-conducteurs dans lesquels une grande quantité d'éléments magnétiques est introduite de sorte que les atomes magnétiques s'ordonnent sur un réseau périodique formant avec les atomes de la matrice un réseau cristallin défini (figure 1.5 2). Les principaux représentants de cette famille sont des chalcogénures ($CdCr_2Se_4, FeCr_2S_4, EuO$)et certaines manganites. Cependant, la structure cristalline de ces matériaux est très différente des semi-conducteurs "traditionnels", ce qui rend leur intérêt d'intégration dans les filières existantes de la micro-électronique (Si, GaAs) limité.

2. les semi-conducteurs magnétiques dilués où les éléments magnétiques substituent aléatoirement les cations : Dans ces composés, quelques pour cent des éléments magnétiques (impuretés) sont introduits dans une matrice semi-conductrice hôte afin de faire apparaitre une phase ferromagnétique sans modifier la structure cristalline (figure 1.5 3). Ce sont les porteurs de charges du semi-conducteur qui assurent le couplage ferromagnétique entre les moments magnétiques localisés sur les impuretés (le 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. En fonction de la matrice semi-conductrice hôte nous distinguerons plusieurs types de DMS :
   - le type IV à base de Silicium ou de Germanium dopés au Cr, Mn, Ni ou Fe : Ils sont faiblement présents dans le monde des DMS à cause de la difficulté à étudier la polarisation en spin des porteurs et à cause de leur gap indirect.

- le type IV-VI comme le $Pb_{1-x-y}Sn_xMn_yTe$: Ces matériaux ont une très grande densité de porteurs, suffisante pour provoquer l'apparition d'une phase ferromagnétique. Toutefois ces matériaux ne sont pas compatibles avec ceux constituant l'électronique moderne, car leur structure cristallographique est différente.
- le type II-VI comme le ZnTMO et le CdTMTe (TM = ion de la série des métaux de transition) : Les propriétés magnétiques de ces matériaux sont dominées par les interactions de super-échange antiferromagnétique entre les spins localisés. Ceci induit un caractère paramagnétique, antiferromagnétique ou verre de spin selon la concentration des ions magnétiques incorporés. Jusqu'à présent, ces matériaux n'ont pas réussi à trouver des applications réalistes dans les dispositifs réels, parce que la plupart de leurs propriétés de spin potentiellement utiles se manifestent à des températures très basses.
- le type III-V où on trouve par exemple le $GaMnAs$ et le $InMnAs$: Contrairement au cas des DMS II-Mn-VI, les ions Mn^{2+} dans les DMS à base III-V fournissent non seulement des moments magnétiques, mais aussi des accepteurs et sont donc une source de trous libres. L'un des effets importants de ces transporteurs de charges supplémentaires est qu'ils interviennent dans les interactions entre les moments magnétiques localisés sur les ions Mn, conduisant ainsi à l'ordre ferromagnétique dans ces DMS basés sur III-V, avec des températures de Curie relativement élevées [26].

1.7 Les interactions magnétiques :

On peut considérer les semi-conducteurs magnétiques dilués comme étant un ensemble de deux systèmes l'un comportant des électrons délocalisés (la bande de valence ou bande de conduction) et l'autre contenant les électrons localisés (impuretés magnétiques). Ce qui nous permet de distinguer deux types d'interactions :

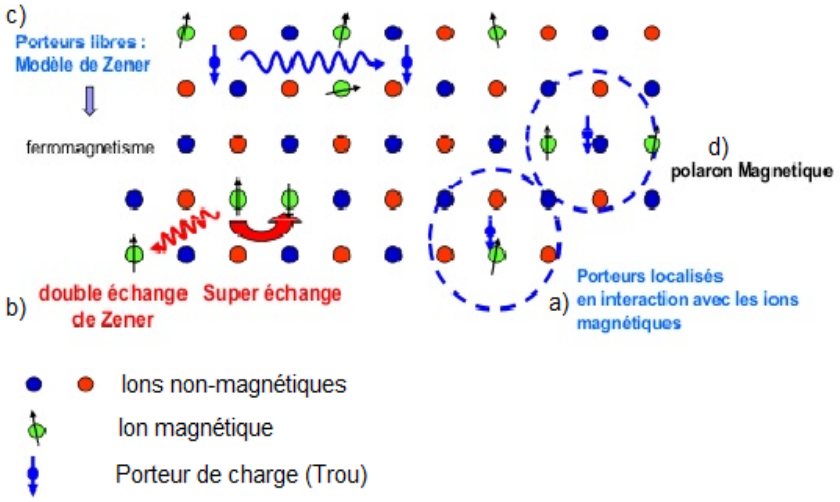


FIGURE 1.6: Les interactions magnétiques a)Interactions entre porteurs délocalisés et ions de magnétique, b)Interactions entre les ions magnétiques, c)Interactions entre les porteurs libres, d)Interaction entre les polarons magnétiques [25].

1.7.1 Interactions entre porteurs délocalisés et ions de manganèse

Les interactions d'échange entre électrons délocalisés et ions magnétiques (interactions sp-d) (figure 1.6a) qui sont responsables, en particulier d'un effet Zeeman géant des états électroniques de valence et de conduction en présence d'un champ magnétique.

Les trous délocalisés se trouvent dans la bande de valence qui est principalement constituée d'orbitales p issues d'atomes d'arsenic. Les moments 3d localisés du manganèse interagissent avec les trous de symétrie p donnant lieu à l'interaction d'échange p-d. L'hamiltonien d'échange H_{pd} entre les trous et les électrons 3d du manganèse s'écrit alors :

$$H_{pd} = -xN_0\beta < S > \sigma \tag{1.1}$$

avec N_0 la concentration volumique, x la concentration des impuretés magnétique, σ et <S> les électrons de spin localisés et les porteurs de charge de spin délocalisés et β l'intégrale de recouvrement des orbitales p et d. De même, il existe aussi une interaction d'échange s-d entre les électrons de la bande de conduction de symétrie s et les électrons 3d localisés du manganèse. L'hamiltonien correspondant s'écrit :

$$H_{sd} = -xN_0\alpha < S > \sigma \tag{1.2}$$

α l'intégrale de recouvrement des orbitales s et d.
En comparant les constantes d'échange des deux interactions, on constate que $N_0\alpha$ étant inférieur en valeur absolue à $N_0\beta$, c'est donc l'interaction d'échange p-d qui sera dominante dans (Ga,Mn)As. Elle est à l'origine du mécanisme d'échange de Zener, modèle qui interprète la phase ferromagnétique dans (Ga,Mn)As [7].

1.7.2 Interactions entre ions de manganèse

Les interactions d'échanges entre les ions magnétiques (interaction d-d) (figure 1.6b), qui couplent les moments localisés sur des sites différents et sont responsables des propriétés magnétiques des DMS. On distingue généralement deux types d'interaction entre impuretés magnétiques, appelées directe et indirecte.

– L'échange direct :

  Se produit lorsqu'il y a un chevauchement direct des bandes des électrons des plus proches voisins des atomes magnétiques. Le mécanisme décrivant cette interaction est à courte portée magnétique. Dans le cas des DMS, la concentration en atomes de manganèse est telle que l'interaction d'échange directe entre les atomes est inefficace, car la distance moyenne entre les impuretés magnétiques est beaucoup plus grande que la distance entre plus proches voisins.

– Le super échange :

  Agit entre deux atomes magnétiques séparés par un atome non magnétique. L'atome magnétique polarise l'atome non magnétique qui polarise à son tour l'atome magnétique le plus proche. Ce processus est favorisé dans le (Ga,Mn)As lorsque la concentration de manganèse (Mn) est élevée, car il favorise un couplage antiferromagnétique entre les impuretés de Mn voisines et réduit donc l'aimantation à saturation.

– Le double échange de Zener :

  Il est issu du mécanisme de diffusion d'une charge entre des deux atomes de manganèse de valences différentes. Le principe de Pauli impose que l'électron échangé soit de spin opposé à ceux

des deux atomes magnétiques, se couple par échange direct et véhicule le moment magnétique entre les impuretés, en provoquant une interaction ferromagnétique dans les (III,Mn)V, ce processus domine dans un régime de basses concentrations de Mn associé à un large gap énergétique.

1.7.3 Modèle de Zener

Ce modèle est parfaitement adapté aux semi-conducteurs $III-V$ dopés au Mn tels que le GaAs ou l'InAs où la distance moyenne entre porteurs (les trous) est plus grande que la distance moyenne entre atomes de manganèse, c'est-à-dire lorsque la concentration de Mn est supérieure à celle des porteurs. L'incorporation du manganèse dans ces semi-conducteurs introduit à la fois les porteurs et le spin donc il crée un dopage de type p. Il existe un couplage d'échange p-d entre les trous de la bande de valence (délocalisés) et les ions Mn^{2+} localisés. Cette interaction d'échange va coupler de façon antiferromagnétique les trous itinérants avec les ions Mn^{2+} et ainsi induire une phase ferromagnétique (figure 1.6c). La présence de cette phase ferromagnétique nécessite donc la présence de trous délocalisés [25]. Dans ce cas, les modèles RKKY et Zener sont équivalents. étant donné que les interactions spin-orbite et porteurs-porteurs ne sont pas prises en compte dans le modèle RKKY, le modèle de Zener est alors utilisé pour décrire les propriétés magnétiques des semi-conducteurs ferromagnétiques [27]. Lorsque le couplage est faible, son caractère ferromagnétique ou antiferromagnétique va dépendre de la distance Mn-Mn. Pour un couplage fort, la distinction entre les bandes "d" localisées et les bandes "s p" tend à s'effacer. Des bandes d'impuretés apparaissent et le système retourne dans un régime où le double échange de Zener domine.

1.7.4 Modèle de polarons magnétiques

L'interaction d'échange des porteurs localisés avec les impuretés magnétiques donne lieu à une formation de polarons magnétiques (figure 1.6d). Dans des systèmes où la concentration de trous est très faible comparativement à la densité d'ions magnétiques, un polaron magnétique est formé d'un trou localisé et d'un grand nombre d'impuretés magnétiques autour de ce trou. Il existe alors des interactions antiferromagnétiques entre le trou localisé et les ions Mn et une interaction ferromagnétique entre les polarons [28]. On peut définir un rayon effectif du polaron (R_p) qui dépend de la température, de l'interaction d'échange entre le trou et l'ion Mn et d'une longueur caractéristique de la fonction d'onde du trou. Lorsque la température diminue, R_p augmente et pour des températures

suffisamment basses, il y a un recouvrement des polarons (percolation). L'interaction ferromagnétique entre les polarons domine l'interaction antiferromagnétique entre les ions manganèse et une phase ferromagnétique s'établit [25].

1.8 Anisotropie magnétique

L'anisotropie est une propriété fondamentale des matériaux magnétiques [29]. C'est la dépendance de l'énergie interne ou la densité d'énergie libre par rapport à l'orientation spontanée de l'aimantation, qui crée une direction facile ou difficile de l'aimantation.
Leur comportement pour les films minces ferromagnétiques avec la structure de zinc blende (comme celle de GaMnAs), l'expression complète de l'énergie libre F peut s'écrire [26] :

$$F = -MH[\cos(\theta)\cos(\theta_H) + \sin(\theta)\sin(\theta_H)\cos(\phi-\phi_H)] + 2\pi M^2\cos^2(\theta) + \frac{1}{2}M[-H_{2\perp}\cos^2(\theta) - H_{2\parallel}\sin^2(\theta)\sin^2(\phi) - \frac{1}{2}H_{4\perp}\cos^4(\theta) - \frac{1}{4}H_{4\parallel}\sin^4(\theta)\cos^2(2\phi)] \quad (1.3)$$

Où H est le champ magnétique appliqué et M est l'aimantation. Le premier terme dans l'équation 1.3 décrit l'énergie de Zeeman, tendant à aligner l'aimantation du matériau avec le champ extérieur ; Le deuxième terme se réfère à l'énergie de démagnétisation (ou à la forme de l'énergie anisotropie), elle est opposée à l'aimantation ; Et le dernier terme donne l'énergie due à l'anisotropie uniaxial et cubique. Ici $H_{2\perp}$ et $H_{4\perp}$ sont respectivement, les champs d'anisotropie uniaxiale et cubique perpendiculaires ; $H_{2\parallel}$ Et $H_{4\parallel}$ sont les champs anisotropes uniaxial et cubique dans le plan(001).

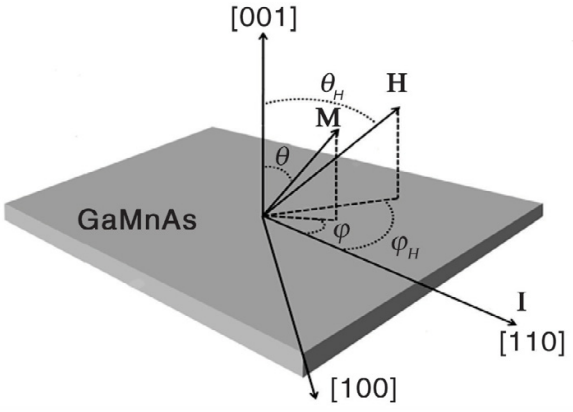


FIGURE 1.7: Représentation des directions cristallines, l'orientation de l'aimantation et le champ magnétique appliqué suivant les angles θ et θ_H sont définis par rapport à [001] ; Et les angles ϕ et ϕ_H sont définis par rapport à [110] dans le plan (001) [26].

L'aimantation totale d'un système préfère s'aligner le long d'un axe préférentiel coutant le moins d'énergie. L'anisotropie magnétique résulte typiquement de deux types d'interaction :

– Le couplage spin-orbite et le champ cristallin qui couple l'aimantation au réseau cristallin, qui est à l'origine de l'anisotropie intrinsèque (magnétocristalline) et magnétoélastique.
– L'interaction dipolaire entre moments magnétiques, dont la portée est nettement plus grande, qui est à l'origine de l'anisotropie dipolaire (de forme, de surface ou d'interface).

1.8.1 Anisotropie magnétocristalline

L'anisotropie magnétocristalline dépend de l'orientation de l'aimantation $\vec{M}$ par rapport aux axes cristallographiques. L'interaction spin-orbite est à l'origine de ce type d'énergie. Le mouvement orbital de l'électron donne naissance à un champ magnétique interne proportionnel au moment orbital L, champ qui interagit avec le spin S de l'électron suivant l'hamiltonien $H_{SO} = \xi LS$. Les électrons 3d du manganèse ont une configuration électronique telle que leur moment cinétique orbital est nul. Ainsi, l'interaction spin-orbite aura un effet négligeable sur l'orientation des spins des atomes de manganèse. Par contre, les porteurs de charge possèdent un moment orbital non nul induisant alors un couplage spin-orbite et provoquant une forte anisotropie de la bande de valence. Par l'intermédiaire de l'interaction d'échange, ce couplage aura un effet direct sur l'aimantation. L'anisotropie magnétocristalline nécessite cependant le contrôle de la structure et de l'orientation cristalline des couches considérées et par conséquent elle requiert des techniques d'élaboration appropriées [30].

1.8.2 Anisotropie de forme

L'interaction dipolaire, entre deux moments magnétiques, possède un caractère à longue portée où le couplage dipolaire peut devenir une source d'anisotropie suivant la forme de l'échantillon. Dans le cas des couches minces, cette interaction est la principale source favorisant une aimantation parallèle au plan. En raison de sa dépendance à la forme de l'échantillon, l'interaction dipolaire est généralement appelée anisotropie de forme. La forme géométrique gouverne la répartition et l'interaction entre les moments magnétiques qui composent l'échantillon. Ce couplage fait apparaitre un champ démagnétisant qui tend à réduire les zones où les lignes de champ traversent la surface de l'échantillon de façon perpendiculaire. Ainsi si l'échantillon n'a pas une forme isotrope, le champ démagnétisant va forcer l'aimantation à suivre certaines directions préférentielles en dessous d'une température critique dite température de curie.

1.8.3 Anisotropie magnétoélastique

L'énergie d'anisotropie magnétoélastique résulte des contraintes dues à la déformation des mailles. Le moment magnétique étant fortement lié aux orbitales atomiques, toute déformation du réseau cristallin sous l'action d'une contrainte extérieure induit une modification des propriétés magnétiques. Cette déformation peut même altérer la direction d'aimantation du matériau. Dans le cas de films minces, il existe souvent une différence entre le paramètre de maille du film et celui du substrat, ce qui peut induire des contraintes élastiques à l'interface. L'anisotropie magnétoélastique, malgré son caractère volumique se comporte comme un effet d'interface, car son intensité moyenne décroît avec l'épaisseur à cause de la relaxation plastique. L'anisotropie d'interface ou de surface ne peut se manifester que pour une épaisseur limitée, car l'énergie du champ démagnétisant croît proportionnellement à l'épaisseur et finit par dominer [30].

1.9 Le GaMnAs un semi-conducteur magnétique dilué

L'incorporation du manganèse (Mn) dans les semi-conducteurs III-V (tel que GaAs) crée un dopage de type p. Le Mn se comporte comme accepteur et comme moment magnétique de spin $S = \frac{5}{2}$, le trou de spin $j = \frac{3}{2}$ est localisé autour du manganèse. L'ensemble formant un complexe manganèse-trou (Mn-hole) dont le moment total (dans l'état fondamental) est $J = S + j = 1$ [31].

Les propriétés magnétiques et électroniques de (Ga,Mn)As sont très sensibles à la position des atomes de Mn dans la matrice. La maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ idéale consiste en une maille de zinc blende de GaAs dans laquelle une portion des ions du gallium est remplacée aléatoirement par des atomes de manganèse. La faible solubilité du manganèse dans la matrice du GaAs mène au positionnement de cet atome en site interstitiel, Mn_i, lorsque le dopage est élevé [32]. Comme on peut citer des arsenics en site gallium (As_{Ga}). En particulier, les manganèses interstitiels et les arsenics en anti-site sont donneurs d'électrons dans le GaMnAs et par conséquent, leur présence diminue la densité des trous. De plus lorsque des manganèses interstitiels et substitutionnels sont proches voisins, ils se couplent en interaction antiferromagnétique et forment une paire dite gelée : ils ne participent alors plus au magnétisme collectif ce qui aboutit à la diminution de l'aimantation à saturation [33].

1.9.1 Origine de ferromagnétisme dans GaMnAs :

Deux types d'interactions magnétiques sont à l'origine de ferromagnétique dans le semi-conducteur magnétique dilué (Ga,Mn)As selon la concentration des porteurs. Lorsque la densité est faible, les atomes de manganèse sont trop éloignés les uns des autres pour permettre un recouvrement des orbitales 3d et donc il n'y a pas d'échange direct ni de super-échange dans le GaMnAs [34]. Les trous sont considérés localisés autour du manganèse, et le ferromagnétisme est induit par la formation de polarons magnétiques et le modèle de bande d'impureté. Lorsque la densité des trous est suffisamment importante, le ferromagnétisme peut être décrit par le modèle de mécanisme d'échange p-d de Zener et les trous se délocalisent dans la matrice du GaAs[35].

L'atome de manganèse constitue un centre accepteur situé à 113 meV au-dessus du sommet de la bande de valence du GaAs [31]. Cette énergie de liaison entre le trou et le centre accepteur a pour origine le potentiel coulombien d'attraction ainsi que l'hybridation p-d entre les orbitales de l'atome du manganèse et les porteurs des charges (trous). Pour de faibles concentrations en manganèse, la densité de porteurs n'est pas suffisante pour écranter le potentiel coulombien crée par les atomes de manganèse. Il y a peuplement des états d'impuretés créés autour du centre accepteur et les porteurs de charge restent localisés. Lorsque la concentration en atomes de manganèse augmente, cette bande d'impuretés fusionne avec le haut de la bande de valence et les porteurs sont délocalisés. Cela coïncide avec une transition de type métal-isolant [7].

1.9.2 Anisotropie magnétique de GaMnAs

On a constaté que l'anisotropie magnétique des GaMnAs dépendait de nombreux paramètres, y compris la température, les contraintes et la densité de porteurs. Elle est déterminée par l'anisotropie des porteurs. La particularité des films minces ferromagnétiques à base des semi-conducteurs (GaMnAs) est le fait que, contrairement au cas des films métalliques (Fe, Co,...), l'anisotropie de forme est négligeable par rapport aux anisotropies induites par les contraintes. Ceci est lié au caractère "magnétique dilué". L'effet du champ cristallin sur l'orientation des spins des manganèses n'est que secondaire et il n'est pas à l'origine de l'anisotropie magnétique de GaMnAs. Car la répartition électronique de l'ion manganèse est relativement isotrope puisque sa configuration électronique est en d^5 et son moment cinétique est uniquement dû au moment intrinsèque de spin ($s = \frac{5}{2}$) [35]. L'origine des contraintes est le désaccord de maille entre le substrat et les films épitaxiés. Bien qu'il soit faible, il est suffisant pour orienter les axes faciles d'aimantation dans le plan ou hors de plan. Les résultats de Shen et al

ont montré que la couche de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ présente un axe de facile aimantation dans le plan de la couche si elle est déposée sur un substrat de GaAs et hors du plan si elle est déposée sur (Ga,In)As [36].

Chapitre 2

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

2.1 Introduction

L'un des problèmes de la physique des solides présentant un défi d'actualité pour les physiciens de la matière, c'est de comprendre et maitriser l'organisation intime de ces particules qui composent les cristaux. Le cadre idéal à cette étude est la mécanique quantique dont l'objectif est d'obtenir une solution de l'équation de Schrödinger qui soit la plus proche possible de celle du système physique réel et qui donne une description complète d'un système quantique composé de **N** électrons et **M** noyaux en interaction. Des outils mathématiques sont utilisés pour la résolution de ce problème, ce sont les méthodes de calcul ab-initio. Parmi les méthodes ab-initio on cite : la théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT). Une théorie proposée par Hohenberg et Kohn pour le calcul de la structure électronique dans laquelle la densité électronique $\rho(\vec{r})$ occupe une place centrale, au lieu de la fonction d'onde à **N** corps $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$.
En fait, cette idée de base d'une écriture de l'énergie totale du système comme une fonctionnelle de la densité de charge est introduite pour la première fois par Thomas-Fermi (1927) [37, 38], développée théoriquement par Hohenberg-Kohn (1964) pour la formulation de leur théorie de la *DFT* et reprise par la suite par Kohn-Sham (1965) pour le développement de leur approche de calcul des structures électroniques [39]. Il s'agit d'une théorie exacte dans son principe qui permet de calculer toutes les propriétés de l'état fondamental, dont l'énergie. Au moment où la fonction d'onde multiélectronique dépend de **3N** variables, la densité n'est fonction que de trois variables, ce qui réduit considérablement les temps de calculs et permet d'étudier des systèmes de tailles considérables hors de portée des autres méthodes basées sur la fonction d'onde [40, 41, 42].

2.2 Hamiltonien total du cristal

Du point de vue de la taille microscopique, un solide peut être vu comme un ensemble de particules lourdes : des noyaux positivement chargés, et de particules plus légères : des électrons négativement chargés. L'hamiltonien total du cristal (non relativiste) résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : répulsion ou attraction suivant la charge des particules (noyaux, électrons) [43]. Il est écrit sous la forme suivante :

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{n,e} + \hat{V}_{e,e} + \hat{V}_{n,n} \tag{2.1}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_i \frac{\nabla^2 \vec{R}_i}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2}\sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{i,j}\frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{i,j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{i,j}\frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \tag{2.2}$$

M_i, m_e sont les masses du noyau et de l'électron respectivement et $\vec{R}_i$, $\vec{r}_i$ leurs positions. Pour connaître l'état de ce système (fonction d'onde) l'équation de Schrödinger correspondante doit être résolue :

$$\hat{H}\Psi(\vec{R},\vec{r}) = E\Psi(\vec{R},\vec{r}) \tag{2.3}$$

En raison du degré élevé de complexité, il est impossible de résoudre cette équation sans appliquer quelques approximations.

2.3 L'approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer est appliquée de manière à ramener le problème à plusieurs corps (**N** électrons et **M** noyaux) de départ en un problème à électrons seuls (polyélectroniques) à travers une dissociation de l'effet des noyaux, exprimé sous la forme d'une interaction externe, de celui du nuage électronique. L'approximation tient compte du fait que le mouvement des particules légères (électrons) et lourdes (noyaux) est fortement différent, en mettant en évidence le grand écart entre la masse des électrons du système (plus légers, donc de plus grande mobilité) et celle des noyaux (relativement plus lourds $M_{noyau} \simeq 1800 \times m_{électron}$, donc mobilité plus réduite). Pour cette raison, le mouvement des noyaux par rapport aux électrons peut être négligé, c'est-à-dire que les noyaux seront considérés comme figés [44]. Dans ce contexte, l'énergie cinétique des noyaux est nulle ($T_n = 0$) et l'énergie coulombienne ($V_{n,n} = C$) due à la répulsion entre noyaux devient constante.

L'équation de Schrödinger correspondante peut être écrite sous la forme :

$$[\hat{T}_e + \hat{V}_{n,e} + \hat{V}_{e,e} + C]\Psi_i(r) = E_i\Psi_i(r) \tag{2.4}$$

Cet hamiltonien correspond à un système de **N** électrons en interaction dans le potentiel externe produit par les noyaux. Par un choix convenable de l'origine des énergies, l'énergie potentielle noyaux-noyaux devient nulle. Le hamiltonien résultant peut être écrit comme :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{V}_{ext} \tag{2.5}$$

Cependant, le problème électronique est un problème à **N** corps ; la fonction d'onde totale du système dépend des coordonnées de tous les électrons et ne peut pas être décomposée en contributions de particules isolées, car ces dernières interagissent entre elles. Le problème est complexe et difficile à résoudre, à moins de le réduire à un problème à une seule particule. Deux approximations possibles permettent de réduire le problème à **N** électrons sous une forme effective à un seul électron : l'approximation de Hartree-Fock, pour laquelle l'énergie totale du système est fonctionnelle de la fonction d'onde et la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) pour laquelle l'énergie totale est une fonctionnelle de la densité électronique du système en mettant en évidence les effets de corrélations électroniques.

Dans le cas de notre étude, on a basé nos calcul en adoptant "La théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*)" énoncée par les théorèmes de Hohenberg et Kohn.

2.4 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn

La théorie de la densité fonctionnelle est fondée sur les théorèmes de Hohenberg et Kohn [45] :

– Théorème 01 : Il existe une correspondance entre le potentiel extérieur et la densité électronique $\rho(r)$ permettant de représenter le premier comme une fonctionnelle de l'état fondamental de la deuxième. Par conséquent, l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique, soit :

$$E = E[\rho(r)] \tag{2.6}$$

Ce théorème est à la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité et explique l'appellation qui lui a été donnée.

– Théorème 02 : L'énergie totale de l'état fondamental est minimale pour la densité d'état fondamental ρ_0 par rapport à toutes les densités conduisant au nombre correct d'électrons.

$$E(\rho_0) = minE(\rho) \tag{2.7}$$

ρ_0 : la densité de l'état fondamental.

Ce second théorème équivaut à un principe de minimisation qui peut être utilisé pour déterminer la densité fondamentale. Si la forme de la fonctionnelle énergie est connue, la densité peut être déterminée en utilisant le second théorème.

La fonctionnelle de l'énergie totale de l'état fondamental s'écrit comme suit :

$$E_{V_{ext}}(\rho) = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r})\hat{V}_{ext}(\vec{e})d\vec{r} \tag{2.8}$$

$$F_{HK}[\rho] = < \Psi|\hat{H} + \hat{V}|\Psi > \tag{2.9}$$

La fonctionnelle $F_{HK}[\rho]$ est universelle pour n'importe quel système d'électrons.

2.5 Les équations de Kohn-Sham

Kohn et Sham ont introduit un développement supplémentaire qui consiste à remplacer un système réel à plusieurs électrons en interaction soumis au potentiel réel (système interactif) en un système fictif non interactif placés dans un potentiel effectif V_{eff} dont l'énergie de l'état fondamental est caractérisé en tout point par la même densité que le système d'électrons en interaction.
De ce fait, la densité électronique et l'énergie du système réel sont conservées dans ce système fictif.

La fonctionnelle énergie $F_{HK}[\rho]$ a été écrite par Kohn et Sham [46] de la manière suivante :

$$F_{HK}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] \tag{2.10}$$

Où $T_0[\rho]$ désigne l'énergie cinétique d'un gaz des électrons de densité ρ et sans interaction, $V_H[\rho]$ contient l'interaction classique de Coulomb et $V_{xc}[\rho]$ qui est appelée énergie d'échange et de corrélation, décrit toutes les contributions quantiques à N-corps (est une fonctionnelle additionnelle qui

décrit l'interaction inter-électronique).

L'hamiltonien du système (appelé Hamiltonien de Kohn-Sham) devient :

$$\hat{H}_{KS} = \hat{T}_0 + \hat{V}_{eff} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{xc} + \hat{V}_{ext} \tag{2.11}$$

$$\hat{H}_{KS} = \frac{\hbar^2}{2}\sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{m_e} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{\rho(\vec{r'})}{|\vec{r} - \vec{r'}|} d\vec{r'} + V_{xc} + V_{ext} \tag{2.12}$$

Le potentiel d'échange et de corrélation V_{xc} est lié à la fonctionnelle énergie d'échange-corrélation par la relation de dérivation suivante :

$$\hat{V}_{xc} = \frac{\delta V_{xc}[\rho]}{\delta \rho} \tag{2.13}$$

Le théorème de Kohn et Sham peut être maintenant formulé comme suit : La densité exacte d'état fondamental d'un système de **N** électrons est :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i(\vec{r})^* \phi_i(\vec{r}) \tag{2.14}$$

Où $\phi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde d'une seule particule, est la solution de l'équation de Kohn et Sham :

$$\hat{H}_{KS}\phi_i = \varepsilon_i \phi_i \tag{2.15}$$

L'équation de Kohn-Sham doit être résolue de façon auto-cohérente, obtenue à l'aide d'un processus d'itérations afin de trouver la densité de l'état fondamental, ce qui nécessite le choix d'une base pour les fonctions d'ondes que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales appelées orbitales de Kohn-Sham (KS) écrites sous la forme suivante :

$$\phi_i(\vec{r}) = \sum C_{ij}\varphi_j(\vec{r}) \tag{2.16}$$

Où les $\varphi_j(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les C_{ij} les coefficients de développement.
Donc cette résolution se résume à la détermination des coefficients C_{ij} pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale.

Notons que pour la *DFT*, seules l'énergie totale, l'énergie de Fermi et la densité électronique ont un sens physique. Les états et les énergies de Kohn-Sham ne sont que des intermédiaires de calcul. Néanmoins, ils sont utilisés dans de nombreux travaux scientifiques, pour calculer certaines grandeurs comme les structures de bande.

La seule contribution inconnue dans ce problème est la fonctionnelle d'échange-corrélation, d'où la nécessité d'introduire des approximations.

2.6 Les approximations de la fonctionnelle d'échange-corrélation

Pour résoudre l'équation de Kohn-Sham des approximations sur la forme de l'énergie d'échange-corrélation doivent être introduites. La densité de charge ρ obtenue en résolvant l'équation de Kohn-Sham de façon auto-cohérente serait la densité de l'état fondamental. Cependant, cette solution ne peut être recherchée que si la forme de l'énergie d'échange-corrélation est connue [47]. Cette énergie se trouve décomposée en deux termes :

– le terme d'échange qui traduit le fait que les électrons sont des fermions indiscernables ;
– le terme de corrélation qui est le reste de l'interaction coulombienne entre chaque électron après avoir enlevé le terme de Hartree et le terme d'échange.

$$\varepsilon_{xc} = \varepsilon_x + \varepsilon_c \tag{2.17}$$

Deux grandes approximations de la densité s'inscrivent dans cette approche :

2.6.1 L'approximation de la densité locale

La première approximation à avoir été utilisée est l'approximation de la densité locale (Local Density Approximation : *LDA*) ou sa version dépendante du spin (Local Spin Density Approximation : *LSDA*).

L'approximation la plus simple, fonctionne raisonnablement bien dans le cas d'une densité ρ variant lentement, car selon cette approche, l'énergie d'échange et de corrélation est choisie en chaque point r comme étant le potentiel d'échange-corrélation d'un gaz d'électrons libres de densité uniforme $\rho(\vec{r})$. L'énergie d'échange-corrélation totale E_{xc} s'exprime en fonction de l'énergie d'échange-corrélation par particules ε_{xc} telle que :

$$E_{xc}^{LDA}(\rho(\vec{r})) = \int \rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}(\rho(\vec{r}))d\vec{r} \tag{2.18}$$

Où ε_{xc} n'est plus une fonctionnelle de la densité mais juste une fonction.
La partie échange est calculée par la fonctionnelle d'énergie d'échange formulée par Dirac :

$$\varepsilon_x(\rho(\vec{r})) = -\frac{3}{4}(\frac{3}{\pi})^{\frac{1}{3}} \int \rho(\vec{r})^{\frac{4}{3}} d\vec{r} \tag{2.19}$$

La partie corrélation est quant à elle tirée de calculs de Monte-Carlo quantique : en fait, c'est une paramétrisation de ces résultats par des règles de sommes et des comportements aux limites. Il en existe de nombreuses, comme celles de Hedin-Lundqvist [48], Perdew-Zunger [49] ou Volko-Wilkes-Nusair [50].

2.6.2 L'approximation de la densité de spin locale

Cette approximation a eu beaucoup de succès, même pour des systèmes qui sont très différents du gaz uniforme d'électrons. Elle a cependant tendance à surestimer les énergies de liaisons, et à sous-estimer les longueurs de liaisons. L'approximation locale de la densité de spin (*LSDA* : Local Spin Density Approximation) est une généralisation directe de la *LDA* pour inclure le spin électronique :

$$E_{xc}^{LSDA}(\rho(\vec{r})) = \int \rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}(\rho_\uparrow(\vec{r}), \rho_\downarrow(\vec{r}))d\vec{r} \tag{2.20}$$

Des expressions très précises pour l'énergie d'échange-corrélation ε_{xc} ont été construites à partir de simulations de Monte-Carlo quantique du gaz uniforme d'électrons. Il existe de nombreux travaux de paramétrisation, de ε_{xc} comme celle proposée par Perdew et Zunger en 1981 [49], ou Perdew et Wang en 1992 [51].

La répartition des électrons selon leurs spins nous permet de déduire le moment magnétique des systèmes que nous étudions. Le magnétisme est donc directement lié à l'énergie d'échange-corrélation puisque c'est le seul terme sensible au spin des électrons. La prise en compte explicite du spin dans l'énergie d'échange est introduite par la *LSDA* :

$$\varepsilon_x(\rho(\vec{r})) = -2^{\frac{1}{3}}\frac{-3}{4}(\frac{3}{\pi})^{\frac{1}{3}} \int (\rho_\uparrow(\vec{r})^{\frac{4}{3}}\rho_\downarrow(\vec{r})^{\frac{4}{3}})d\vec{r} \tag{2.21}$$

2.6.3 L'approximation du gradient généralisé

Dans plusieurs cas la *GGA* donne des améliorations par rapport à la *LDA*, en particulier lorsque les propriétés dépendent des détails de densité locale, comme les systèmes magnétiques.
Une façon d'aller au-delà de l'approximation *LDA* est de considérer un gaz d'électron uniformément variant. L'énergie d'échange et de corrélation ne dépend plus alors de la seule densité, mais également du gradient de la densité $\nabla\rho(\vec{r})$ [52].

Ces fonctionnelles sont connues sous le nom de l'approximation du gradient généralisé (*GGA*) :

$$E_{xc}^{GGA}(\rho(\vec{r})) = \int \rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r}))d\vec{r} \tag{2.22}$$

Les fonctionnelles *GGA* différent dans le choix de la fonction ε_{xc}.
La partie échange est calculée sur la même base que pour la *LDA*, mais en ajoutant un facteur d'amélioration $f(\zeta)$ dépendant du gradient :

$$E_{x}^{GGA}(\rho(\vec{r})) = \int \rho(\vec{r})\varepsilon_{x}(\rho(\vec{r}))f(\zeta)d\vec{r} \tag{2.23}$$

$$avec\zeta = \frac{|\nabla\rho(\vec{r})|^2}{[2(3\pi^3)^{\frac{1}{3}}]^2\rho(\vec{r})^{\frac{5}{2}}} \tag{2.24}$$

La partie corrélation reprend la paramétrisation de la *LDA* en ajoutant, soit une nouvelle paramétrisation pour le gradient (c'est le cas des fonctionnelles Becke8, Perdew-Wang ou bien encore modified Perdew-Wang [53]) ; soit un terme plus théorique n'utilisant que des constantes fondamentales (comme la fonctionnelle Perdew-Burke-Ernzerhof [54], actuellement la plus utilisée en physique du solide).

D'une manière générale, les fonctionnelles *GGA* donnent des résultats meilleurs que la *LDA*. Par contre, elles sous-estiment les énergies de liaisons, et surestiment les longueurs de liaisons.

2.7 Approximation sur le potentiel

2.7.1 Approximation Muffin-Tin (MT)

Dans un solide, le potentiel a certaines caractéristiques : près des noyaux, le potentiel est dominé par une singularité de Coulomb sur une distance de l'ordre du rayon de Bohr ($a_0 = 0,529177(\text{Å})$)

et ne s'écarte pas trop de la symétrie sphérique. Dans la région entre les atomes, le potentiel varie doucement et n'est jamais très profond. C'est à partir de ces considérations physiques et de leur applicabilité mathématique, qu'a été mise au point l'approximation dite muffin-tin pour construire le potentiel [55].

L'approximation Muffin-Tin est le plus souvent utilisée dans la mécanique quantique pour la simulation de la structure des bandes électroniques dans les solides. Proposée pour la première fois en 1937 par Slater [56], le cristal est divisé en deux régions (2.1) :

– les noyaux atomiques sont inclus dans des sphères non-chevauchantes appelées sphère Muffin-Tin, où le potentiel est supposé à symétrie sphérique.
– des zones interstitielles entre les sphères (ZI) où le potentiel varie très lentement.

$$\begin{cases} V_0 & r > R_{MT} \\ V(|r|) & r < R_{MT} \end{cases}$$

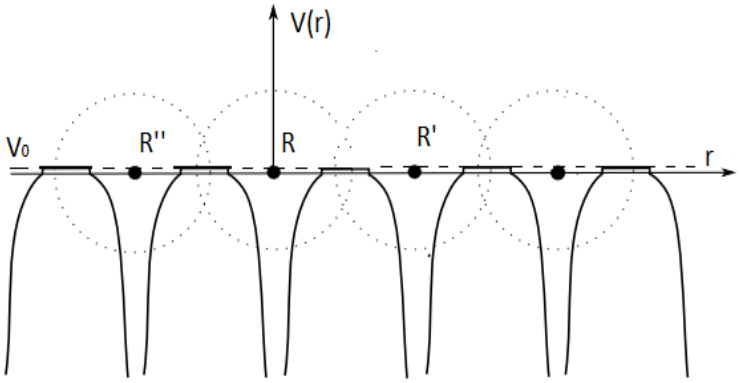


FIGURE 2.1: Forme du potentiel Muffin tin :à l'intérieur des sphères,un potentiel sphérique est utilisé contre un potentiel constant à l'extérieure.

2.7.2 Approximation des sphères atomiques (ASA)

L'approximation *ASA* utilise des sphères atomiques en chevauchement, où le potentiel est étendu dans les harmoniques sphériques dans les sphères latérales, mais toute contribution de la région interstitielle est négligée. Une telle méthode fournit des bandes d'énergie raisonnablement bonnes[57].

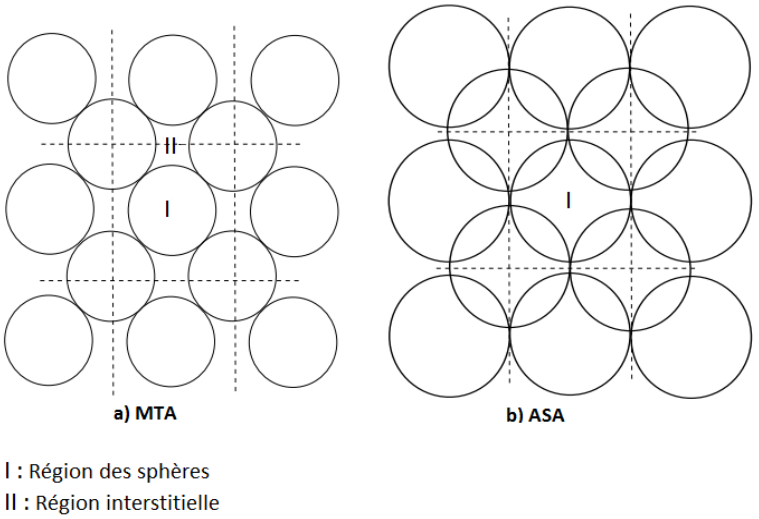


FIGURE 2.2: Forme des sphères atomiques suivant les approximations ASA et Muffin-Tin a)Sphères Muffin-Tin b)Sphères ASA.

2.7.3 La méthode des orbitales muffin-tin linéarisées

La méthode des orbitales muffin-tin linéarisées (*LMTO*) est une méthode de calcul très performante pour résoudre les équations de Kohn-Sham en physique de la matière condensée. C'est l'une des méthodes les plus utilisées dans le calcul de l'énergie totale des matériaux, elle était développée au départ par Andersen (1975) [58] ; très rapide, car les fonctions des bases peuvent être mise au point pour donner une description précise du système, mais avec une forme mathématique plus compliquée [59]. La méthode *LMTO* a été utilisée suivant les approximations Muffin-Tin(*MTA*) et les approximations de sphères atomiques (*ASA*) ou de potentiel complet (*PLW*) (qui offre la meilleure précision au prix de l'augmentation du temps de calcul).

2.7.4 Approximation de potentiel complet (Full potential LMTO)

La méthode est basée sur l'approximation "Muffin-Tin" pour décrire le potentiel cristallin. *PLW* est une approximation de potentiel complet qui utilise des sphères appelées Muffin-Tin qui ne se chevauchent pas, où le potentiel est représenté par des sépansions harmoniques sphériques et la région interstitielle où le potentiel est développé dans les ondes planes [58].

Chapitre 3

Résultats et discussions

3.1 Introduction

La fabrication du matériau $GaMnAs$ est effectuée par épitaxie par jets moléculaires (MBE) sur un substrat de $GaAs$. La couche magnétique de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ est déposée sur une couche tampon de $Ga_{1-y}In_yAs$. Le rôle de cette dernière est d'étirer la couche de $GaMnAs$ dans le plan, et créer des contraintes de dilatation pour orienter l'axe de facile aimantation perpendiculairement au plan de la couche (figure 3.1).

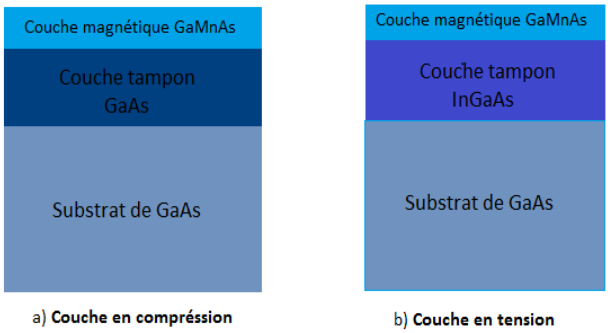


FIGURE 3.1: a) Structure d'une couche en compression. b) Structure d'une couche en tension.

Pour étudier l'effet de la contrainte d'épitaxie structurale, nous avons fait une étude théorique basée sur un calcul ab-initio. Dans cette étude une caractérisation structurale et électronique est réalisée

suivie d'une analyse de l'effet de la contrainte d'épitaxie sur l'éclatement des bandes d'énergie :

- Une super-cellule de 8 atomes de $GaMnAs$ est adoptée, dans laquelle nous avons varié la concentrations de *Manganèse* (25%, 50%, 75%) et nous avons calculé les différentes propriétés structurales, électroniques et magnétiques des films de $Ga_{1-x}Mn_xAs$.
- Les concentrations de $l'Induim$ dans la couche tampon $Ga_{1-y}In_yAs$ modélisés pour varier la contrainte afin d'étudier son effet sur la division des bandes des trous lourds et des trous légers dans la bande de valence de semi-conducteur sont : (25%, 50%, 75%).

3.2 Méthode de calcul

Nous avons réalisé un travail de simulation numérique basé sur la théorie de la *DFT*, afin d'examiner les différentes propriétés structurales, électroniques et magnétiques du matériau $GaMnAs$ et l'influence de l'introduction d'une couche tampon de $InGaAs$ sur ce dernier. Nos calculs sont effectués par un calcul ab-initio en utilisant le logiciel *Mindlab M-studio*. **PLW** de la **FP-LMTO** est la méthode utilisée pour traiter l'énergie d'échange et de corrélation à travers les différentes approximations (*LDA, LSDA* dans une paramétrisation **Volko-Wilkes-Nusair** [50], et la *GGA* dans une paramétrisation **Perdew-Burke-Ernzerhof** [54]).

3.3 Propriétés structurales

3.3.1 Structure cristalline des composés binaires

La structure cristallographique des composés binaires de type $III-V$ est une structure zinc blende, constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc) décalés l'un par rapport à l'autre d'une translation de $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ suivant la direction (111). Elle fait partie du groupe d'espace $F\bar{4}3m$. Les valeurs expérimentales de paramètre de maille de chaque composé trouvé dans la littérature sont :

$$\begin{cases} a_{GaAs} = 5.653\text{Å}[60] \\ a_{InAs} = 6.058\text{Å}[61] \\ a_{MnAs} = 5.34\text{Å}[62] \end{cases}$$

À partir de ces valeurs et afin d'obtenir les paramètres de mailles théoriques qui mènent à la structure la plus stable de la couche magnétique et de la couche tampon, nous avons fait une optimisation de la cellule zinc blende de chaque structure des composés binaires. Pour cela, nous avons calculé l'énergie totale correspondante à chaque valeur en utilisant les approximations *LDA* et *GGA*. Ensuite, pour déterminer la constante de maille d'équilibre, nous avons tracé les courbes de la minimisation d'énergie en fonction du volume, en utilisant le logiciel *Origine Pro 8*, et en faisant un ajustement de la courbe obtenue par la fonction polynomiale quadratique de Murnaghan [63, 64, 65] (l'équation 3.1) qui permet de traiter la courbe de l'énergie.

$$E(V) = \frac{B_0 V}{B_0^{'}(B_0^{'}-1)}\left[B_0^{'}(1-\frac{V_0}{V}) + (\frac{V_0}{V})^{B_0^{'}} - 1\right] + E_0 \tag{3.1}$$

avec E(V) est l'énergie totale à l'état fondamentale en fonction du volume.

V_0 est le Volume de la maille primitive de zinc blende en état d'équilibre, donné par :

$$V_0 = \frac{a^3}{4} \tag{3.2}$$

B_0 est le module de compressibilité évalué. Il représente une pression δP. Il est défini par :

$$B_0 = -V_0\frac{\delta P}{\delta V} = V_0\frac{\delta^2 E}{\delta V^2} \tag{3.3}$$

et $B_0^{'}$ est la dérivée de B_0 par rapport à la pression P, déterminé par la relation :

$$B_0^{'} = \frac{dB_0}{dP} \tag{3.4}$$

Les courbes de minimisation d'énergie sont représentés dans les figures (3.2, 3.3).

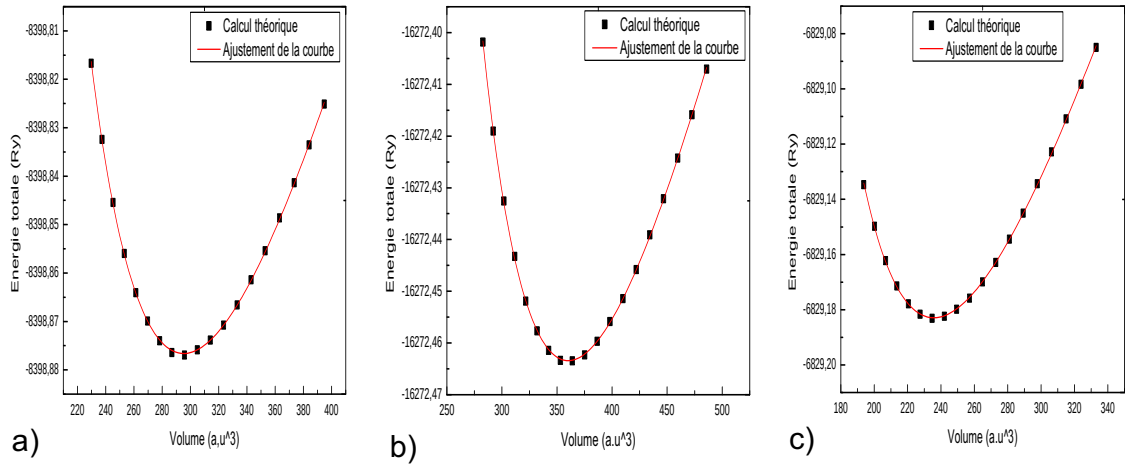


FIGURE 3.2: Minimisation d'énergie des composés binaire a. GaAs, b. InAs, c. MnAs par le calcul LDA.

Les résultats obtenus sur l'ajustement des courbes de minimisation d'énergie sont représentés dans les tableaux (3.1, 3.2).

	a (Å)	B_0 (GPa)	$B_0^{'}$
GaAs	5.592	8.176	4.509
InAs	5.975	7.168	4.898
MnAs	5.188	14.304	4.605

TABLE 3.1: Propriétés structurales des composés binaires (calcul par LDA)

on remarque que :

- a_{InAs} est supérieur à a_{GaAs} qui est supérieur à a_{MnAs}
- $B_{0_{InAs}}$ est inférieur à $B_{0_{GaAs}}$ qui est inférieur à $B_{0_{MnAs}}$

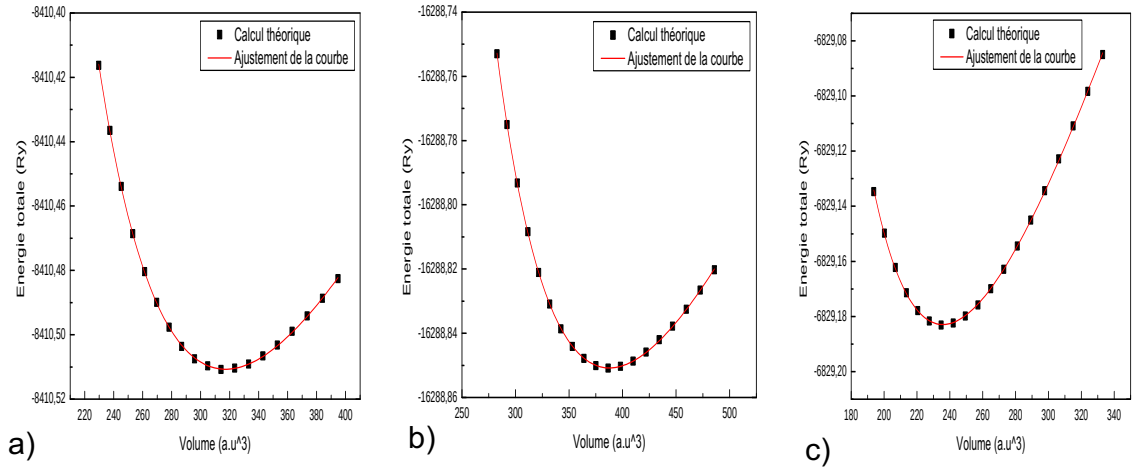


FIGURE 3.3: Minimisation d'énergie des composés binaire a. GaAs, b. InAs, c. MnAs par le calcul GGA.

	a (Å)	B_0 (GPa)	$B_0^{'}$
GaAs	5.728	6.928	4.225
InAs	6.124	5.904	4.543
MnAs	5.188	14.304	4.605

TABLE 3.2: Propriétés structurales des composés binaires (calcul par GGA)

On remarque que nous avons obtenu le même ordre de paramètre de maille et de module de compressibilité en *GGA* que celui de *LDA* des composés binaires.

On note aussi que :

– la *LDA* sous-estime le paramètre de maille et sur-estime le module de compressibilité.
– Par contre, la *GGA* sur-estime la valeur du paramètre de maille et sous-estime le module de compressibilité.

En utilisant ces résultats, nous passons à l'étude des alliages ternaires (de la couche magnétique et la couche tampon).

3.3.2 Structure cristalline des alliages ternaires

$GaMnAs$ et $InGaAs$ sont principalement fabriqués par épitaxie par jets moléculaires (MBE). Ces structures cristallographiques sont celles de $GaAs$, c'est à dire une structure de type blende de zinc dans laquelle une partie des atomes de Ga a été substituée préférentiellement par des atomes de Mn dans l'alliage de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ ou de In dans l'alliage de $In_yGa_{1-y}As$.

La forme de la structure de ces alliages diffère selon la concentration de l'impureté :

– pour $x = 0.25$ et $x = 0.75$, c'est la configuration Luzonite qui est adopté.
– pour $x = 0.50$, c'est la configuration chalcopyrite qui est adopté.

La configuration électronique de Mn isolé est $3d^5 4s^2$. Ce dernier a un moment cinétique orbital nul ($L = 0$) et un moment cinétique intrinsèque de spin $S = 5/2$. Le Ga a la configuration électronique la plus proche $4p^1 4s^2$ [66, 60, 67, 68].

Au sein de la matrice de $GaAs$ le Mn adopte la configuration électronique $A_0(d^5 + h)$. Il établit par hybridation de ses orbitales quatre liaisons covalentes avec les As proches voisins. Comme il n'apporte que deux électrons de valence, au lieu de 3 pour le Ga, il se comporte en accepteur et est donc à l'origine d'un dopage de type **p** [7, 34].

La variation du paramètre de maille du ternaire $A_{1-x}B_xC$ en fonction de la concentration **x** suit une loi dite de Vegard. cette loi stipule que les paramètres cristallographiques d'un matériau solide varient linéairement avec la concentration du dopant à température constante lorsque la nature de la

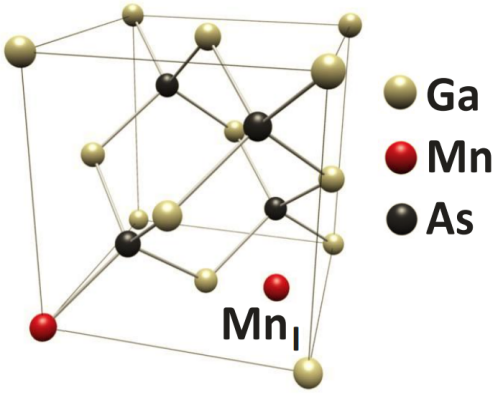


FIGURE 3.4: Structure cristallographique de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ pour Mn_I représente un site interstitielle, et Mn représente un site substitutionnelle.

liaison est similaire dans les phases constitutives. Les atomes de substitution sont statistiquement répartis et le paramètre de maille est contrôlé par la taille relative des atomes ou des espèces échangées [69, 70] :

$$a_{A_{1-x}B_xC}(x) = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} \tag{3.5}$$

Dans le cas de notre étude on considère notre matériau substitutif idéal avec une structure cubique. Le paramètre de maille relaxé $a_{A_{1-x}B_xC}(x)$ d'une couche de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ (ou de $In_yGa_{1-y}As$) dépend de la concentration totale **x** de Mn (ou In) selon une fonction affine interpolant les paramètres de mailles blende de zinc de $GaAs$ ($x_{Mn} = 0$ (ou $y_{In} = 0$)), et de $MnAs$ ($x_{Mn} = 1$) (ou de $InAs$ ($y_{In} = 1$)) :

$$a_{Ga_{1-x}Mn_xAs}(x) = xa_{MnAs} + (1-x)a_{GaAs} \tag{3.6}$$

$$a_{In_yGa_{1-y}As}(y) = ya_{InAs} + (1-y)a_{GaAs} \tag{3.7}$$

En faisant une combinaison linéaire des paramètres de maille d'équilibre calculés par l'approximation *LDA* des composés binaires, nous obtenons les paramètres de maille de Vegard des alliages ternaires ($Ga_{1-x}Mn_xAs$ et $In_yGa_{1-y}As$) pour les différentes concentrations (0.25, 0.50, 0.75) :

$$PourGaMnAs \Longrightarrow \begin{cases} a_{GaMn_{0.25}As} = 5.601\text{Å} \\ a_{GaMn_{0.50}As} = 5.389\text{Å} \\ a_{GaMn_{0.75}As} = 5.288\text{Å} \end{cases}$$

$$Pour\,InGaAs \Longrightarrow \begin{cases} a_{In_{0.25}GaAs} = 5.687\text{Å} \\ a_{In_{0.50}GaAs} = 5.783\text{Å} \\ a_{In_{0.75}GaAs} = 5.878\text{Å} \end{cases}$$

En suivant les mêmes étapes que dans l'étude de la variation d'énergie en fonction du volume de composé binaire (en utilisant l'approximation *LDA*), nous avons fait une minimisation d'énergie des composés ternaire en utilisant l'équation de Murnaghan (l'équation 3.1) pour ajuster les courbes obtenues (figures 3.5 et 3.6).

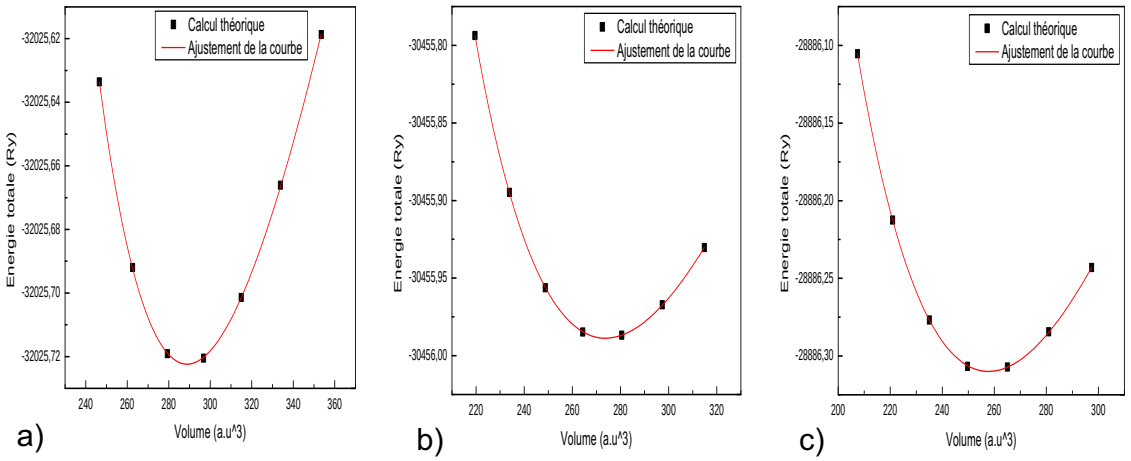


FIGURE 3.5: Minimisation d'énergie du $Ga_{1-x}Mn_xAs$ pour les concentrations a) 25%, b) 50%, c) 75% par le calcul LDA.

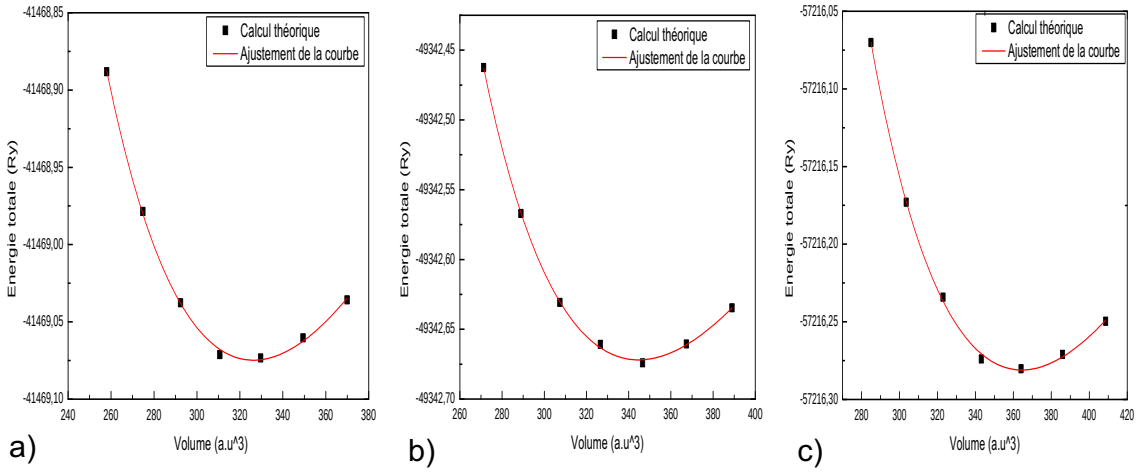


FIGURE 3.6: Minimisation d'énergie de la couche tampon $In_yGa_{1-y}As$ pour les concentrations a) 25%, b) 50%, c) 75% par le calcul LDA.

La différence entre les courbes obtenues se voit dans une différence d'énergie et de volume, suite à la variation de la concentration des dopants.

L'ajustement de la courbe E(V) donne le volume théorique d'unité d'équilibre V_0, le module de compressibilité isotherme B_0 et son dérivé par rapport à la pression $B_0^{'}$ regroupés dans le tableau 3.3.

	a (Å)	B_0 (GPa)	$B_0^{'}$
$GaMn_{0.25}As$	5.551	33.392	4.838
$GaMn_{0.50}As$	5.453	38.672	4.323
$GaMn_{0.75}As$	5.345	44.864	4.241
$In_{0.25}GaAs$	5.781	27.328	4.207
$In_{0.50}GaAs$	5.887	26.272	4.777
$In_{0.75}GaAs$	5.998	23.712	4.725

TABLE 3.3: Propriétés structurales des alliages ternaires (calcul par LDA)

On constate que :

- la variation de paramètre de maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ et de $In_yGa_{1-y}As$ dépend de la concentration du dopant et que les valeurs des paramètres de maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ sont inférieures à celles de $In_yGa_{1-y}As$.
- la valeur de $a_{In_yGa_{1-y}As}$ augmente en augmentant la concentration en atomes de In.
- la valeur de $a_{Ga_{1-x}Mn_xAs}$ diminue en augmentant la concentration en atomes de Mn.

L'utilisation de l'approximation *LSDA* nous a aussi permis d'obtenir les courbes de minimisation de l'énergie par rapport au volume de la couche magnétique $a_{Ga_{1-x}Mn_xAs}$ (figure 3.7).

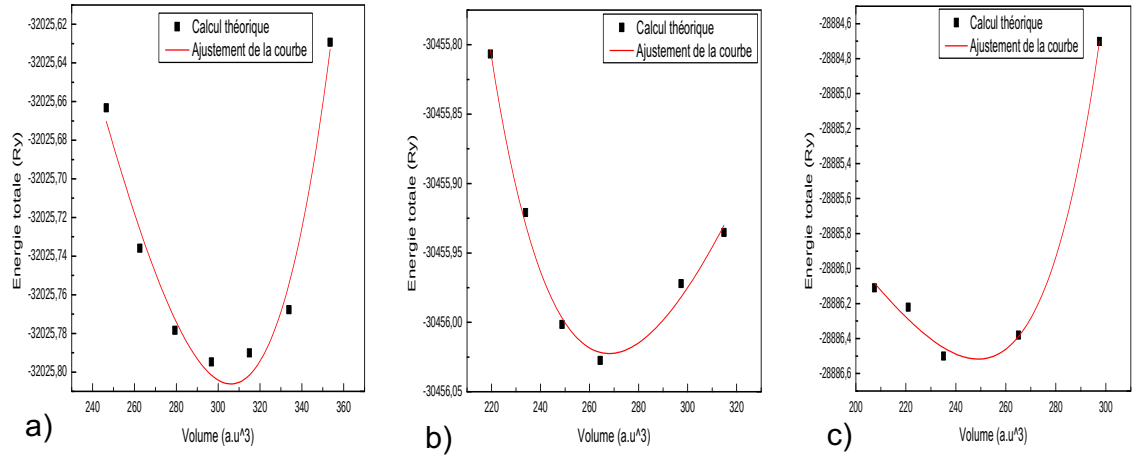


FIGURE 3.7: Minimisation d'énergie de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ pour les différentes concentrations a. 25%, b. 50%, c. 75% (calcul LSDA).

Le tableau 3.4 suivant regroupe les paramètres structuraux calculés par *LSDA* :

	a (Å)	B_0 (GPa)	$B_0^{'}$
$GaMn_{0.25}As$	5.660	54.512	-7.108
$GaMn_{0.50}As$	5.415	50.416	5.526
$GaMn_{0.75}As$	5.283	319.999	-10.191

TABLE 3.4: Propriétés structurales de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ calculée par LSDA

On remarque que les résultats obtenus dans l'étude des propriétés structurales de la couche magnétique $Ga_{1-x}Mn_xAs$ par les deux approches (*LDA* et *LSDA*) sont comparables même si l'approximation *LSDA* est plus précise que celle de *LDA*. On remarque que les valeurs de module de compressibilité sont plus élevées dans le cas de l'approche de *LSDA*.

Il ressort de notre étude structurale que : $a_{In_yGa_{1-y}As} > a_{GaAs} > a_{Ga_{1-x}Mn_xAs}$.

– Les valeurs des paramètres de maille de la couche magnétique $Ga_{1-x}Mn_xAs$ sont inférieures à celles de $GaAs$.
– Les valeurs de paramètres de maille de la couche tampon $In_yGa_{1-y}As$ sont supérieures à celles de $GaAs$.

Le paramètre de maille des alliages ternaires dépend de la concentration des dopants, et des paramètres des composés binaires.

Ces résultats sont expliqués par la fait que l'atome de l'$indium$ est plus grand que celui du $gallium$. Par contre, l'atome de $manganèse$ est plus petit que celui de *gallium*.

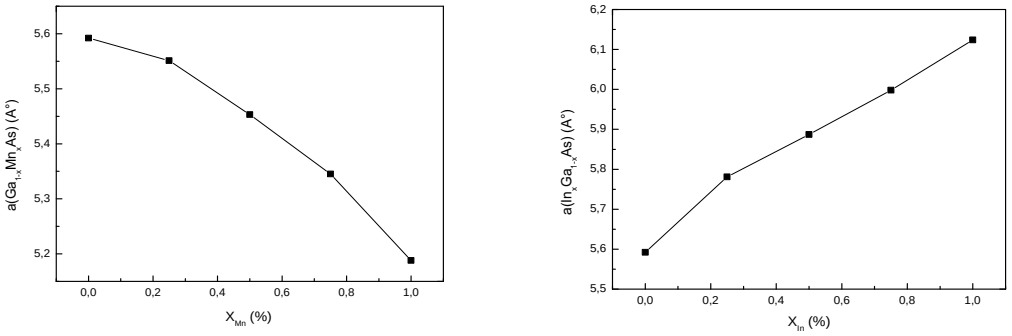


FIGURE 3.8: La variation de paramètre de maille de a) $Ga_{1-x}Mn_xAs$ par rapport à la concentration de l'Mn. et b) $In_yGa_{1-y}As$ par rapport à la concentration de l'In.

Dans les résultats obtenue par Ohno, Zhao et Sadowski[60, 71, 72], on trouve que les valeurs des paramètres de maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ sont supérieures à celles de $GaAs$, et que la constante de maille des films *(Ga,Mn)As* augmente linéairement avec la composition de Mn (En suggérant une

incorporation homogène d'atomes de Mn dans l'alliage de zinc-blende). Selon Masek et al.[73] la constante de maille de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ peut même diminuer avec une augmentation de **x** pour une concentration qui ne dépasse pas 3%.

Ce désaccord apparent essentiellement à l'optimisation de la structure idéale prise dans nos calculs, les sites interstitielles et les anti-sites ne sont pas pris en considération dans nos calculs.

Le manque de base théorique solide et les écarts observés expérimentalement dans plusieurs systèmes suggèrent que la loi de Vegard devrait être réduite à une approximation. Ce n'est pas une règle ou une généralisation qui décrit la variation des paramètres du réseau dans les limites de l'incertitude expérimentale même pour des solutions solides substitutives idéales avec une distribution statistique des atomes[70].

3.4 Propriétés électroniques et magnétiques

En physique du solide, la théorie des bandes est une modélisation des états d'énergie que peuvent occuper les électrons d'un solide. Les électrons d'un atome isolé prennent des niveaux discrets d'énergie, qui sont en fait constitués de sous niveaux. Lorsqu'on rapproche N atomes, ces niveaux (ou sous niveaux) se dégénèrent. Ce qui fait apparaitre des bandes d'énergie permises, qui peuvent se chevaucher et se séparer à nouveau lorsque la distance inter-atomique diminue, donnant des bandes d'énergie interdite de largeur E_g (Gap). De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles qui sont séparés par des bandes d'énergie interdites. La bande permise complètement remplie est appelée "bande de valence". La bande d'énergie permise qui la suit est appelée "bande de conduction". Elle peut être vide ou partiellement remplie. L'énergie qui sépare la bande de valence de la bande de conduction est appelée le "gap" (bande interdite). Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible de faire la distinction entre isolant, semi-conducteur, et conducteur. Les propriétés électroniques du solide dépendent donc essentiellement de la répartition des électrons dans ces deux bandes de conduction et de valence, ainsi que de la valeur de l'énergie de gap.

Dans ce contexte, Nous avons calculé les structure des bandes d'énergie des matériaux $GaAs$, $MnAs$ et de l'alliage *GaMnAs*, en utilisant l'approximation *LDA* et *LSDA*.

3.4.1 Structure des bandes électroniques

Nous avons examiné les propriétés électroniques de l'alliage ternaires $GaMnAs$ en fonction de la concentration de l'impureté magnétique Mn ($x = 0.25, 0.5, 0.75$), en utilisant les deux approximations (*LDA* et *LSDA*).

Le calcul des structures des bandes est fait en considérant les variations de l'énergie E en fonction de k selon les directions de plus haute symétrie de l'espace réciproque (l'espace des vecteurs d'onde k). Dans ces directions, et en se limitant à la première zone de Brillouin, la structure des bandes dans les composés $GaMnAs$ pour les différentes concentrations est illustrée dans les figures 3.9 et 3.10 suivantes :

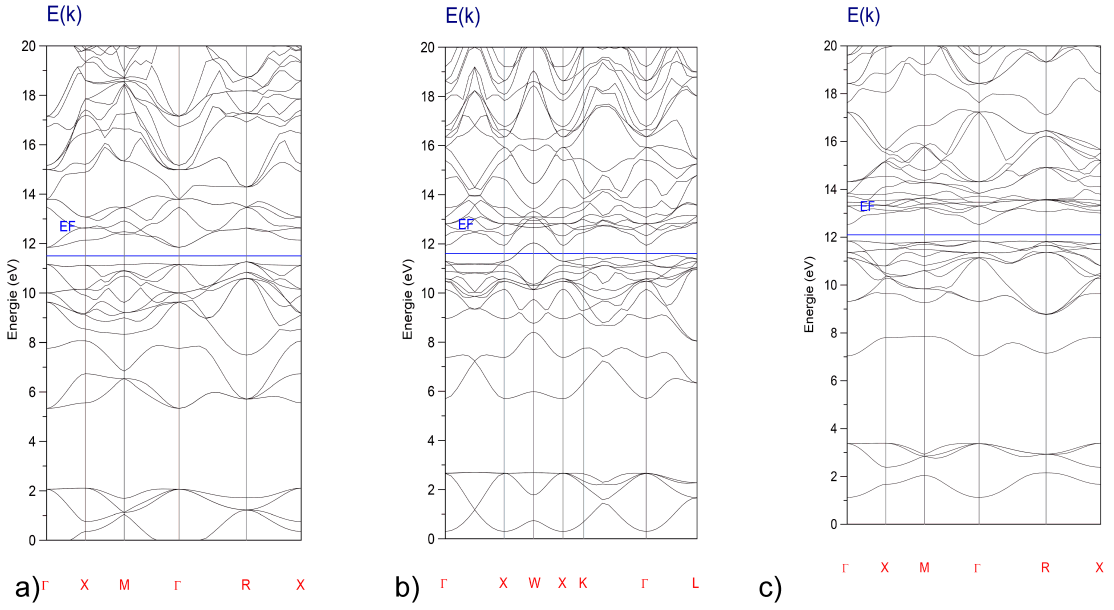


FIGURE 3.9: Structure des bandes de a) $GaMn_{0.25}As$, b) $GaMn_{0.50}As$, c) $GaMn_{0.75}As$ calculé par LDA.

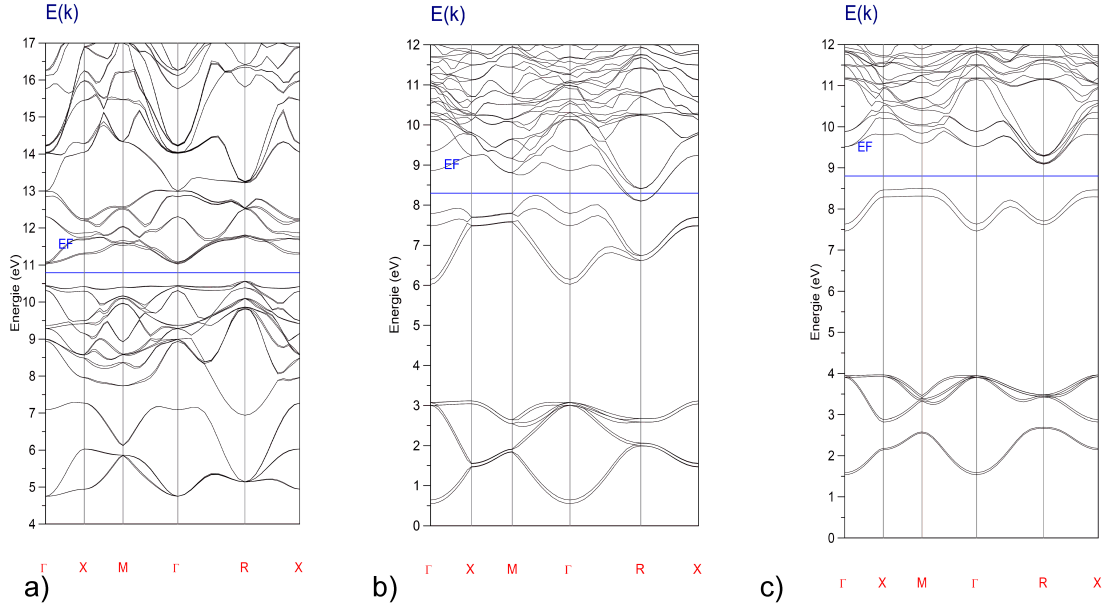


FIGURE 3.10: Structure des bandes de a) $GaMn_{0.25}As$, b) $GaMn_{0.50}As$, c) $GaMn_{0.75}As$ calculé par LSDA.

Cet alliage ne présente pas le même comportement en variant la concentration, pour les deux approximations. Pour $x = 0.25$ et $x = 0.75$ le GaMnAs est un semi-conducteur d'un gap direct au point de haute symétrie Γ (sauf dans le cas de $GaMn_{0.75}As$ $(LSDA)$ où nous avons obtenu un gap indirecte).

Pour $GaMn_{0.50}As$ le composé devient un semi-métal (il apparait un chevauchement entre la bande de valence et la bande de conduction).
Plusieurs bandes peuvent exister au niveau du sommet de la bande de valence. Leurs tangentes définissent la masse effective des trous lourds et trous légers.
L'approximation *LSDA* prend en considération de la différence des populations électroniques de spin up et spin down dans le traitement de l'énergie d'échange-corrélation. Cela explique l'apparition des bandes dédoublées. On constate que les valeurs de l'énergie de gap changent par rapport à l'approximation utilisée. Les résultats sont données dans le tableau suivant :

	E_g(eV)$(x=0.25)$	E_g(eV)$(x=0.5)$	E_g(eV)$(x=0.75)$
LDA	0.682	-0.09	0.687
LSDA	0.582	-0.15	0.595

TABLE 3.5: L'énergie de gap de $GaMnAs$ pour déférentes concentrations (x) calculées par *LDA* et *LSDA*

On remarque que : pour chaque concentration **x**, *LDA* donne des valeurs d'énergie de gap (E_g) les plus grande.
Alors que la *LDA* et la *LSDA* ont été appliquées avec succès à une large gamme de matériaux pour les propriétés structurelles et chimiques, certaines propriétés électroniques, en particulier l'énergie de gap ne sont pas prédites de manière fiable. L'analyse de l'écart de bande (E_g) entre les valeurs propres de la bande de valence et de conduction sous-estime les écarts de bande pour la plupart des semi-conducteurs, des isolants et des systèmes fortement corrélés[74]. Par exemple, la valeur de E_{gGaAs} à $0k$ est, $1.42eV$. L'approximation LDA, nous donne la valeur de $0.45eV$.

3.4.2 Paramètre de courbure

Nous avons trouvé que les valeurs E_g sont différentes des valeurs réelles données pour les semi-conducteurs.

Nous allons étudier alors, la tendance de la variation du gap d'énergie de l'alliage ternaire $GaMnAs$ en fonction de la concentration de l'impureté magnétique Mn dans la matrice semi-conductrice de $GaAs$, nous allons calculer le paramètre de courbure (bowing parameter).

Pour mieux comprendre les origines physiques de ce paramètre, nous avons suivi la méthode développée par Zunger et al. [75, 76, 77] qui rend compte des effets chimiques et des modifications structurales. Cette méthode consiste à considérer l'alliage dans une structure ordonnée constituée par une super-cellule cubique contenant huit atomes. Dans le cas général, Bernard et Zunger considèrent un

alliage ternaire $A_{1-x}B_xC$ à une concentration unique de ($x = \frac{1}{2}$), composé de deux molécules binaire AC et BC suivant la réaction :

$$AC(a_{AC}) + BC_(a_{BC}) \rightarrow A_{0.5}B_{0.5}C(a_{eq}) \tag{3.8}$$

L'alliage $GaMnAs$ à 50% de Mn est formé suivant la réaction :

$$GaAs(a_{GaAs}) + MnAs(a_{MnAs}) \rightarrow Ga_{0.5}Mn_{0.5}As(a_{eq}) \tag{3.9}$$

Où a_{GaAs} = 5.60(Å) et a_{MnAs} = 5.19(Å) sont les constantes de maille d'équilibre des composés binaires, et a_{eq} = 5.45(Å) est la constante de maille en équilibre d'alliage ternaire $GaMnAs$ (calculé précédemment dans l'étude des propriétés structurales). Le réseau du $GaAs$ comprimé et celui de $MnAs$ dilaté à la constante de la maille de l'alliage $GaMnAs$, la constante de maille devient une fonction de x suivant la relation :

$$a(x = 0.5) = \frac{a_{GaAs} + a_{MnAs}}{2} \tag{3.10}$$

$$= 5.3905(\text{Å}) \tag{3.11}$$

qui est équivalent à l'application de la loi de Vegard pour ($x = 0.5$).

Le paramètre de courbure b[78, 79] se présente sous la forme de la somme de trois contribution distinctes (b_{VD}, b_{CE} et b_S) :

$$b = b_{VD} + b_{CE} + b_S \tag{3.12}$$

Avec, b_{VD} représente la réponse de la structure de bande des composés binaires a la déformation du volume (VD) sous l'effet de la pression hydrostatique, il est défini par :

$$b_{VD} = 2[E_{gGaAs}(a_{GaAs}) - E_{GaAs}(a) + E_{gMnAs}(a_{MnAs}) - Eg_{MnAs}(a)] \tag{3.13}$$

b_{CE} représente l'échange de charge entre les deux composés $GaAs$ et $MnAs$ car la charge de l'atome As est différente dans le $GaAs$ et le $MnAs$ alors qu'elle est la même dans le composé ternaire. Cette

différence de l'énergie de Madelung affecte la structure des bandes [80] suivant la relation :

$$b_{CE} = 2[E_{gGaAs}(a) + E_{gMnAs}(a) - 2E_{gGaMnAs}(a)] \tag{3.14}$$

b_S représente la relaxation de la liaison structurale. Elle est le résultat du passage de l'alliage d'un état initial non relaxé à un état final relaxé, donné par :

$$b_s = 4[E_{gGaMnAs}(a) + E_{gGaMnAs}(a_{eq})] \tag{3.15}$$

3.4.2.1 Énergie de Gap

Les structures de bandes électroniques sont calculées en utilisant les paramètres de maille d'équilibre et les paramètres obtenus par la loi de Vegard.
Nous décrivons les structures électroniques de $GaAs$ et $MnAs$ et $GaMn_{0.5}As$.

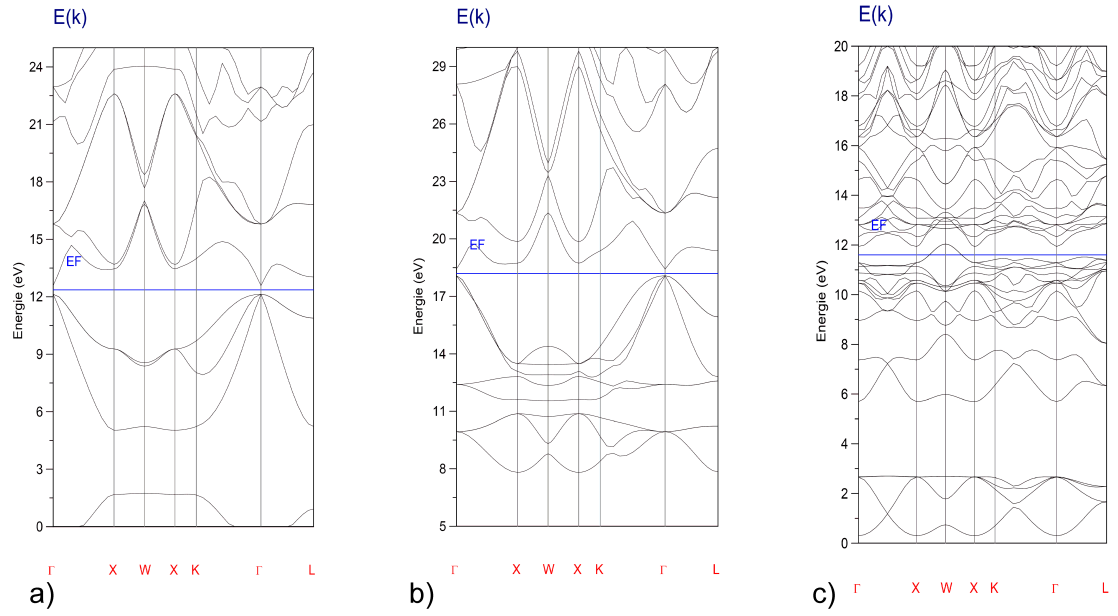


FIGURE 3.11: Structure des bandes calculée à la constante de maille d'équilibre. a) GaAs, b) MnAs, c) $Ga_{0.5}Mn_{0.5}As$

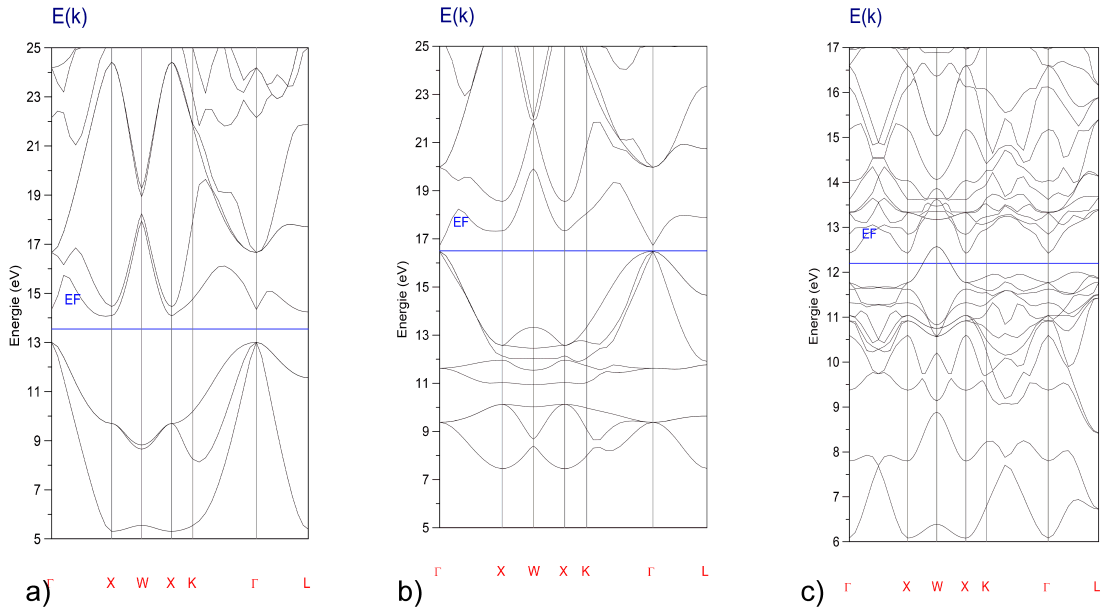


FIGURE 3.12: Structure des bandes calculée à la constante de maille de vegard. a) GaAs, b) MnAs, c) $Ga_{0.5}Mn_{0.5}As$

La structure générale des bandes des deux composés binaires est la même. Ils possèdent tous un gap direct, c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction sont situés au point Γ centre de la zone de Brillouin, ($K = 0$). Le calcul de structure des bandes nous a permis d'extraire les valeurs du gap d'énergie des différents composés au point de haut symétrie Γ. Le tableau 3.6 regroupe l'énergie de gap obtenue pour chaque composé :

	E_{gGaAs}(eV)	E_{gMnAs}(eV)	$E_{gGaMn_{0.5}As}$(eV)
à L'équilibre	0.4561	0.3437	0.6517
à Vegard	1.3329	0.2433	0.6551

TABLE 3.6: L'énergie de gap de Vegard et d'équilibre calculée pour chaque composé.

Nous remarquons que l'énergie de gap des composés binaires ($GaAs$ et $MnAs$)est plus faible que l'énergie de gap de l'alliage ternaire ($GaMn_{0.5}As$). En changeant le paramètre de maille l'énergie de gap change.

À partir de ces résultats, nous pouvons calculer les différentes contributions des valeurs du paramètre de courbure b (la composante de déformation volumique b_{VD}, la composante d'échange de charge b_{CE}, et la composante de relaxation structurelle b_S) suivant la direction $(\Gamma - \Gamma)$du réseau réciproque :

$$\begin{cases} b_{VD} = -1.5528eV \\ b_{CE} = 0.2659eV \\ b_s = 5.2274eV \end{cases}$$

$$b = 3.9405eV \tag{3.16}$$

Les résultats montrent que : b_{CE} et b_{VD} sont faibles, et n'ont pratiquement aucun effet sur la valeur finale du paramètre de courbure b, et que la contribution principale dans b est due essentiellement à la relaxation de la liaison structurale ($b_S = 5.2274eV$). Les résultats que nous avons obtenus sont en accord avec ceux trouvés par Pelá, Ferreira et al., dans l'étude de bowing parameter de $GaMnAs$, par exemple [81] où ils ont utilisé les deux approximation GGA et $GGA-1/2$, et ils ont trouvé les valeurs sont respectivement de 6,7 et 3,9 eV.

Ces valeurs révèlent la possibilité de former des alliages stables, sans qu'il y ait apparition d'un grand désordre.

3.4.3 Effet de la concentration du Mn sur le gap d'énergie

Les mesures de l'énergie de gap obtenues aux constantes du réseau en équilibre montrent une dépendance non linéaire de sa valeur moyenne $< E_g(x) >$ extraite de la loi de vegard. D'où une correction $bx(1-x)$ est ajoutée.

L'énergie de gap de $Ga_{1-x}Mn_xAs$ peut être représentée en fonction de la concentration x de Mn et exprimée en utilisant la formule suivante [82, 78, 83] :

$$E_g(x) =< E_g(x) > -bx(1-x) \tag{3.17}$$

Avec :

$$< E_g(x) >= xE_{gMnAs} + (1-x)E_{gGaAs} \tag{3.18}$$

Où E_{gGaAs} et E_{gMnAs} dénote respectivement le gap d'énergie du $GaAs$ et $MnAs$.

Le gap d'énergie $E_g(x)$ du composé ternaire $Ga_{1-x}Mn_xAs$, peut s'écrit :

$$E_g(x) = xE_{gMnAs} + (1-x)E_{gGaAs} - bx(1-x) \tag{3.19}$$

On trouve alors l'équation du gap d'énergie représentée dans la figure 3.13 sous la forme suivante :

$$E_g = x0.3437 + (1-x)0.4561 - 3.9405x(1-x). \tag{3.20}$$

Ou encore :

$$E_g(x) = 3.9405x^2 - 4.0529x + 0.4561 \tag{3.21}$$

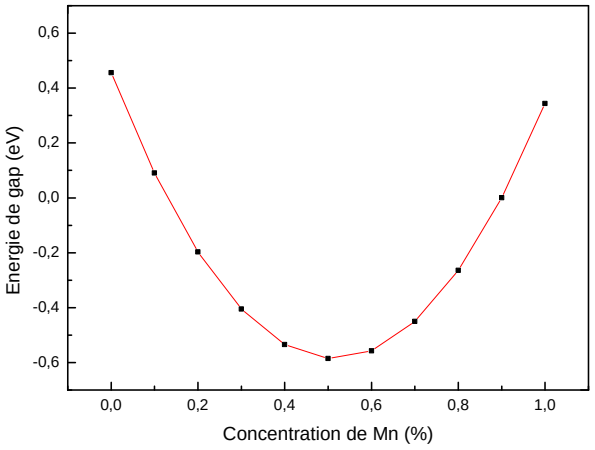


FIGURE 3.13: La variation de l'énergie de gap en fonction de la concentration x.

La dérivée d'énergie de gap $E_g(x)$ par rapport à la concentration **x** est nulle pour un minimum $x = x_m$, définie par :

$$x_m = \frac{1}{2}(1 - \frac{\delta E}{b}) = 0.5 \tag{3.22}$$

Avec :

$$\delta E = |E_{gGaAs} - E_{gMnAs}| = 0.112eV \tag{3.23}$$

La valeur minimale de l'énergie de gap est donnée par la relation :

$$E_{gGaMnAs}(x_m = 0.5) = \frac{E_{gMnAs} + E_{gGaAs}}{2} + \frac{\delta^2 E}{4b} - \frac{b}{4} = -0.5852eV \tag{3.24}$$

Ce qui est en très bon accord avec la valeur obtenue du calcul théorique ($E_{gGaMn0.5As} = -0.6517eV$).

3.4.4 Densité d'état électronique

Les propriétés magnétiques d'un système solide à l'état fondamental sont dues à la différence de populations des niveaux spin up et spin down. C'est la symétrie entre populations de spin up et spin down qui, montre l'absence ou la présence de l'aspect ferromagnétique. Ces propriétés peuvent être déterminé par le calcul de la densité d'état électronique (Density of States), qui représente le nombre d'états disponibles (occupées ou non occupées) par les électrons dans la bande de conduction et par les trous dans la bande de valence, c'est-à-dire elle quantifie le nombre d'états électroniques possédant une énergie donnée dans le matériau considéré. Les calculs de la densité d'état permettent de déterminer la répartition générale des états en fonction de l'énergie et peuvent également déterminer l'espacement entre les bandes d'énergie dans les semi-conducteurs. La densité d'énergie est égale à l'intégrale de la fonction spectrale sur la première zone de Brillouin (**ZB**) :

$$n(E) = \sum_n \int_{ZB} \frac{d^3k}{4\pi^3} \delta(E - \varepsilon_n(k)) \tag{3.25}$$

La description de la densité d'état électronique de $GaMn_{0.25}As$, $GaAs$, $MnAs$, les états des spins majoritaires et des spins minoritaires sont montrés respectivement sur les parties hautes et basses de chaque diagramme dans la figure 3.14 :

la densité d'état électronique totale des composés binaires $GaAs$ non dopé et $MnAs$ projetée entre 6(eV) et 19(eV) est illustrée dans la figure 3.14. Le niveau de Fermi est pris dans la région de gap d'énergie. Nous pouvons confirmer que le $GaAs$ et la $MnAs$ ne possèdent pas un caractère magnétique, puisque ses densités d'état électronique présentent une symétrie parfaite entre les états des spin up et spin down. Par contre, le $GaMn_{0.25}As$ possède un caractère ferromagnétique, puisque sa densité électronique présente une antisymétrique entre les états *Mn-3d* des spin up et spin down.

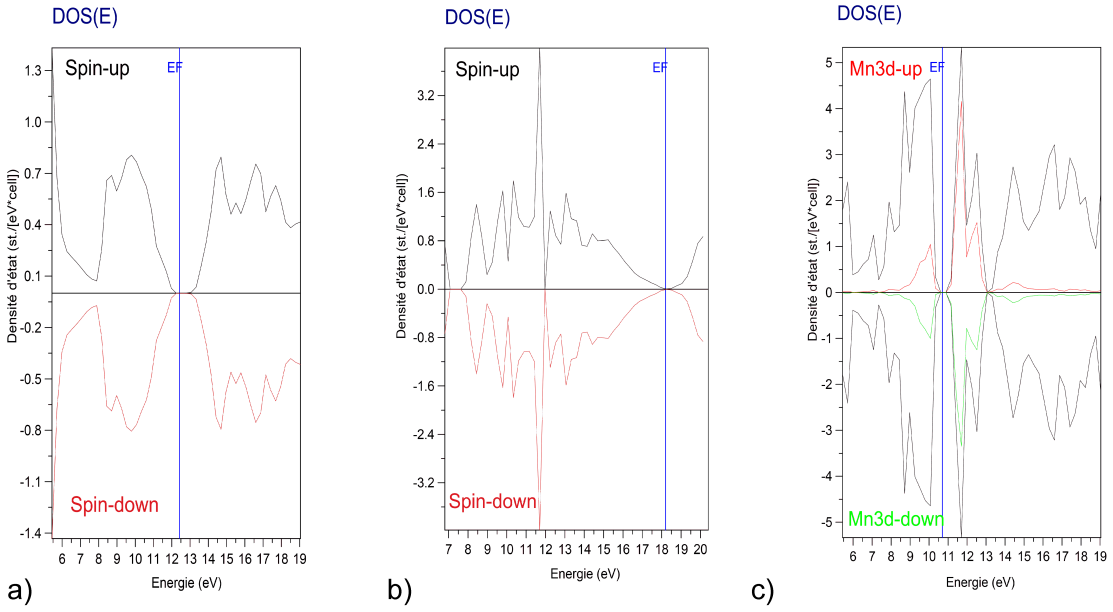


FIGURE 3.14: La densité d'état des différents composés a) GaAs, b) MnAs, et c)$GaMn_{0.25}As$.

Dans le cas général, la comparaison entre la densité d'état d'un $GaAs$ non dopé et l'alliage ternaire $GaMn_{0.25}As$ dopé, permet d'avoir une idée sur le mécanisme physique de la formation des états des trous. Le remplacement d'un atome Ga par un atome Mn ne change pas le nombre des états des spin minoritaires (*down*)dans la bande de valence. Il provoque des bandes d'énergie additionnelles reliées aux états *Mn-3d* des spin majoritaires (*up*) [84]. les états d'impuretés *Mn-3d* se localisent dans la bande de valence proche du gap au niveau d'énergie 11.65 eV. Ce qui montre le caractère ferromagnétique de l'alliage ternaire.

3.5 Effet des contraintes

Les propriétés d'anisotropie magnétique sont modulables en raison de caractère particulier du ferromagnétisme qui résulte d'une interaction d'échange entre ions magnétiques localisés et porteurs délocalisés. L'origine des contraintes est le désaccord de maille entre la couche magnétique ($GaMnAs$) et la couche tampon. Cette contrainte provoque une déformation tétragonale de la maille de $(Ga,Mn)As$ et brise la symétrie cubique. Cette brisure de symétrie lève la dégénérescence entre les bandes des trous légers et celles des trous lourds d'une quantité qui dépend du signe de la contrainte épitaxiale.

En ne faisant varier qu'un seul paramètre à la fois (la concentration de In), nous avons exploré la nature de contrainte en fonction de la différence entre les paramètres de maille de la couche magnétique $GaMnAs$ et la couche tampon $InGaAs$.

Pour des contraintes biaxiales (mêmes contraintes dans le plan suivant les axes x et y), il est possible de décaler les bandes des trous lourds et des trous légers en déformant la maille initialement cubique.

On dénombre trois paramètres qui peuvent contrôler ce phénomène de contrainte d'épitaxie [34, 32, 7] :

- Le potentiel de déformation $b_{def} = -1.7eV$ [34].
- Le ratio des modules d'élasticité : $C_{12}/C_{11} = 0.453$ [34] ou si on prend les valeurs des constantes élastiques du $GaMnAs$: $C_{11} = 11.88$, $C_{12} = 5.32$,$C_{44} = 5.94$ en$10^{11} dyn/cm^2$, on donne la valeur $C_{12}/C_{11} = 0.447$ [85, 86].
- La différence Δa entre paramètre des mailles du substrat et de la couche magnétique : $\Delta a = a_{InGaAs} - a_{GaMnAs}$.

Le tenseur des contraintes a trois principales composantes [87] : deux composantes dans le plan des couches, elles sont équivalentes dans les deux directions X et Y : ϵ_{xx}, ϵ_{yy}. Une tension perpendiculaire suivant la direction de croissance Z : ϵ_{zz}.

Les taux de déformations ϵ_{xx}, ϵ_{yy} et ϵ_{zz} sont définis par :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{\Delta a}{a_0} \tag{3.26}$$

$$\epsilon_{zz} = -2\epsilon_{xx}\frac{C_{12}}{C_{11}} \tag{3.27}$$

La constante de déformation Q_ϵ des couches sous l'effet de la contrainte d'épitaxie est donnée par la relation :

$$Q_\epsilon = \epsilon_{zz} - \frac{\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}}{2} \tag{3.28}$$

$$Q_\epsilon = \epsilon_{xx}[1 - 2\frac{C_{12}}{C_{11}}] \tag{3.29}$$

La déformation tétragonale de la maille imposée par le substrat brise la symétrie cubique du matériau et lève la dégénérescence entre trous lourds (HH) et trous légers (LH) d'une quantité δE, donné par :

$$\delta E = 2b_{def}Q_\epsilon \tag{3.30}$$

En jouant sur le substrat utilisé, en variant la concentrations **y** en In (25%, 50%, 75%) pour une densité de Mn constante. Nous pouvons varier la contrainte, et donc la position relative des sous bandes des trous lourds et trous légers.

Nous avons procédé de deux manières différentes.

3.5.1 Utilisation des paramètres de la minimisation d'énergie

À partir des paramètres de maille d'équilibre obtenue par nos calculs en utilisant l'approximation *LDA* pour $Ga_{1-x}Mn_xAs$, nous avons calculé les paramètres et l'énergie de déformation des différentes contraintes imposé par le substrat pour chaque concentrations **x** en Mn. Les résultats de calcul sont regroupés dans les tableaux 3.7, 3.8, 3.9 suivants :

Pour $a_{GaMn_{0.25}As} = 5.5506$(Å).

	$a_{In_{0.25}GaAs}$ 5.7816 (Å)	$a_{In_{0.50}GaAs}$ 5.8878 (Å)	$a_{In_{0.75}GaAs}$ 5.9981 (Å)
Δa (Å)	0.2310	0.3372	0.4475
$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (%)	0.0416	0.0607	0.0806
ϵ_{zz} (%)	-0.0372	-0.0543	-0.0721
Q_ϵ (%)	-0.0788	-0.1151	-0.1527
δE (eV)	0.2680	0.3912	0.5192

TABLE 3.7: Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.25}As$

Pour $a_{GaMn_{0.50}As} = 5.4524$(Å).

	$a_{In_{0.25}GaAs}$ 5.7816 (Å)	$a_{In_{0.50}GaAs}$ 5.8878 (Å)	$a_{In_{0.75}GaAs}$ 5.9981 (Å)
Δa (Å)	0.3292	0.4354	0.5457
$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (%)	0.0604	0.0799	0.1001
ϵ_{zz} (%)	-0.0540	-0.0714	-0.0895
Q_ϵ (%)	-0.1143	-0.1512	-0.1896
δE (eV)	0.3887	0.5142	0.6445

TABLE 3.8: Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.50}As$

Pour $a_{GaMn_{0.75}As} = 5.3442(Å)$.

	$a_{In_{0.25}GaAs}$ 5.7816 (Å)	$a_{In_{0.50}GaAs}$ 5.8878 (Å)	$a_{In_{0.75}GaAs}$ 5.9981 (Å)
Δa (Å)	0.4374	0.5436	0.6539
$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (%)	0.0818	0.1017	0.1224
ϵ_{zz} (%)	-0.0732	-0.0909	-0.1094
Q_ϵ (%)	-0.1550	-0.1927	-0.2317
δE (eV)	0.5270	0.6550	0.7879

TABLE 3.9: Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.75}As$

Les résultats obtenus rapportent que :

- La couche mince $GaMnAs$ est sous l'effet de contrainte d'épitaxie car il en résulte un décalage entre les bandes des trous lourds et des trous légers d'une quantité δE.
- La constante de maille de la couche magnétique est inférieure à celle de la couche tampon dans tous les cas donc l'écart énergétique est positif, la couche est sous contrainte de tension.
- Les bandes de trous lourds sont remontées en énergie de la quantité $b_{def}Q_\epsilon$ et les bandes de trous légers sont abaissées de la quantité $-b_{def}Q_\epsilon$.
- En augmentant la contrainte, l'écart énergétique augmente (l'écart est proportionnel à la contrainte).

3.5.2 Optimisation par la loi empirique de Sadowski

En prenant des valeurs de concentrations plus faible de l'impureté magnétique de Mn (de l'ordre de 6%), ce qui nous a permit de rapprocher des modèles expérimentaux existants [81].

En comparant nos résultat avec ceux trouvés par Sadowski[88], on trouve que : les valeurs de paramètres de maille de $MnAs$ et de $GaMnAs$ que nous avons utilisé, sont inférieurs à celles trouvées par Sadowski. Ainsi, nous avons considéré une structure idéale dans laquelle nous avous négligé les positions intrstitielles et les anti-sites d'arsinure et nous avons utilisé la loi de Vegard qui fait une combinaison linéaire entre les paramètre de maille des composés binaires pour déterminer les paramètres de maille des alliages ternaires. Par contre, la loi de Sadowski est plutôt empirique fait introduire un terme correctif pour calculer le paramètre de maille réelle. Sadowski prend en considération que la correspondance de paramètre de maille de $GaMnAs$ au site interstissiel et substutisionnel change le paramètre de maille de celle ci [72].

Nous avons répété les mêmes étapes mentionnées dans l'étape précédente, mais pour des concentrations de In qui varient de (0%, 15%, 25%, 50%, 75%).
La valeur expérimentale de la constante de maille de la couche magnétique $Ga_{1-x}Mn_xAs$ peut être donnée par la relation proposée par Sadowski [89] pour une concentration en Mn de 6% :

$$a(Ga_{1-x}Mn_xAs) = 5.65469 + 0.24661x(\text{Å}) \tag{3.31}$$

On trouve le paramètre de maille suivant :$a(GaMn_{0.06}As) = 5.6694866(\text{Å})$.

Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 3.10 suivant :

Pour $a_{GaMn_{0.06}As} = 5.6695(\text{Å})$.

	$GaAs$ 5.5914 (Å)	$a_{In_{0.15}GaAs}$ 5.7137 (Å)	$a_{In_{0.25}GaAs}$ 5.7815 (Å)	$a_{In_{0.50}GaAs}$ 5.8878 (Å)	$a_{In_{0.75}GaAs}$ 5.9981 (Å)
Δa (Å)	-0.0781	0.0443	0.1121	0.2183	0.3286
$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (%)	-0.0138	0.0078	0.0198	0.0385	0.0580
ϵ_{zz} (%)	0.0123	-0.0069	-0.0177	-0.0344	-0.0518
Q_ϵ (%)	0.0261	-0.0148	-0.0375	-0.0729	-0.1100
δE (eV)	-0.0887	0.0503	0.1273	0.2480	0.3733

TABLE 3.10: Les paramètres et l'énergie de déformation pour des différente contraintes imposer sur une couche magnétique de $GaMn_{0.06}As$

La figure 3.15 illustre la variation des paramètres calculés pour les différentes contraintes exercées :

Nous avons remarqué que : la composante ϵ_{xx} et l'écart énergétique δE ont la même variation ; ils accroissent en augmentant la contrainte (proportionnel à la contrainte). Et que la composante ϵ_{zz} et la constante de déformation Q_ϵ ont la même variation ; ils diminuent en augmentant la contrainte (inversement proportionnel à la contrainte).

D'après ces résultats, On peut confirmer que : le signe de la contrainte épitaxiale a une conséquence directe sur la position relative des bandes de trous lourds et légers ($\vec{k} = \vec{0}$). Il est de signe différent selon que la couche soit en tension ou en compression. La constante de maille relaxée de l'alliage $GaMnAs$ est supérieure à celle du $GaAs$ par une quantité qui dépend de la concentration du Mn, la couche est sous contrainte de compression. Dans le cas d'une croissance sur des couches de $InGaAs$ la constante de maille de la couche magnétique est inférieure à celle de la couche tampon, la couche est sous contrainte de tension.

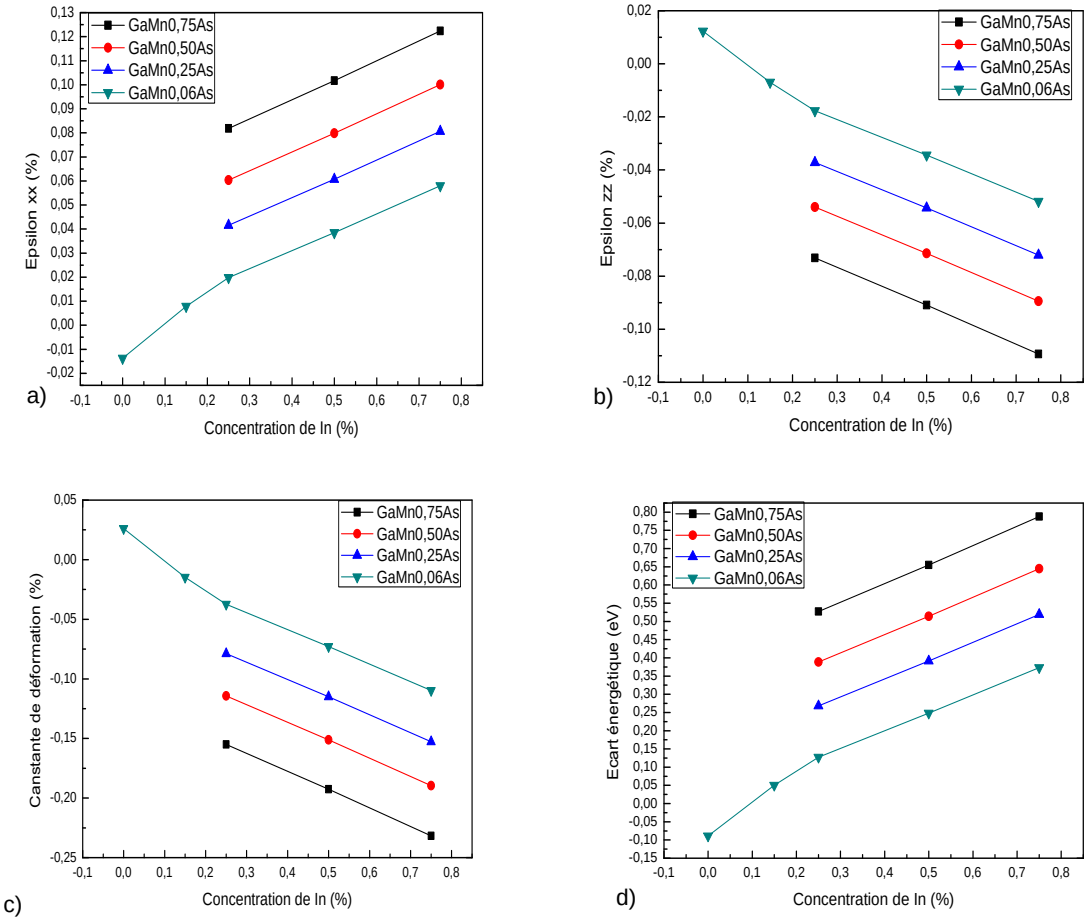


FIGURE 3.15: La variation de a) ϵ_{xx} b) ϵ_{zz} c) La constante de déformation et d) l'écart énergétique en fonction des contraintes exercées pour des concentration de Mn (6%, 25%, 50%, 75%).

Nos résultats sur l'effet des contraintes d'épitaxie pour une concentration de Mn à 6% sont en très bon accord avec ceux trouvés par Daeubler et al., par exemple[90] où la contrainte dans les couches de $GaMnAs$ varie progressivement entre la traction ($\epsilon_{zz} = -0,34\%$ et $\delta E = 0.24eV$) et la compression ($\epsilon_{zz} = 0,22\%$ et $\delta E = -0.15eV$).

3.5.3 Conclusion

Pour une couche de $(Ga,Mn)As$ sans contrainte, les bandes des trous lourds et celles des trous légers sont deux fois dégénérées au point de haut symétrie Γ (3.16 a).

Introduire des contraintes, c'est lever la dégénérescence entre les bandes de trous légers et celles de trous lourds.

Lorsque des contraintes d'extension s'exercent dans le plan, le signe de l'écart énergétique calculé

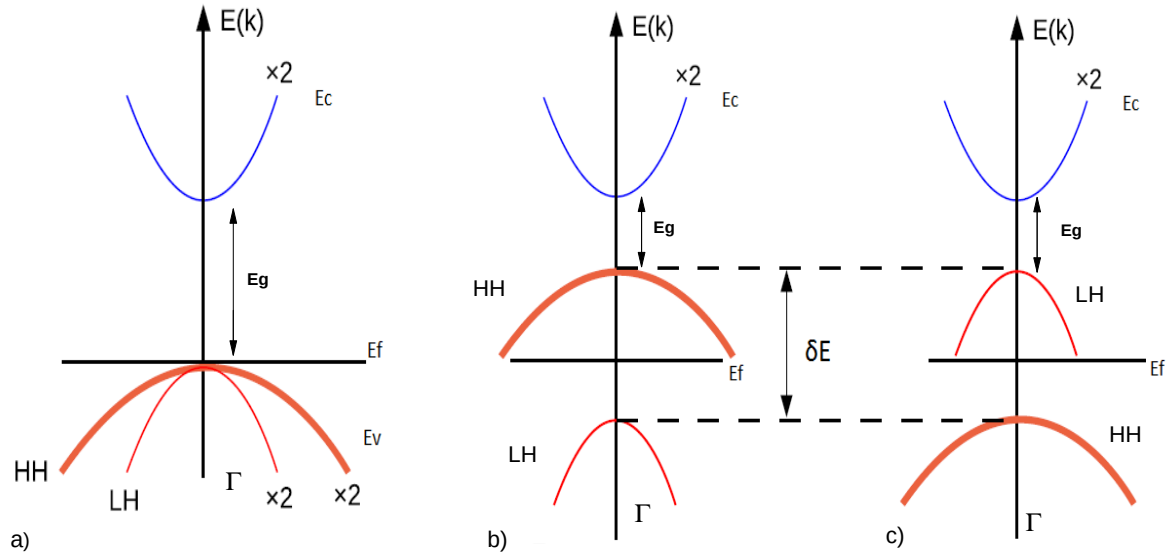


FIGURE 3.16: La structure des bandes de la couche magnétique $GaMnAs$ a) pas de contrainte, b) couche sous contrainte d'extension, et c) couche sous contrainte de compression en $\vec{k} = \vec{0}$ centre de la zone de Brillouin.

est positif, donc la bande de trous lourds est remontée et la bande de trous légers est abaissée en énergie. C'est le cas d'un $(Ga, Mn)As$ déposé sur $(Ga, In)As$ (3.16 b).

Par contre, dans le cas des contraintes de compressions qui s'exercent dans le plan, nous avons constaté que le signe de l'écart énergétique est négatif. Ce qui rapporte que la bande de trous lourds est abaissée en énergie et la bande de trous légers remontée. C'est le cas d'un $(Ga, Mn)As$ déposé sur $GaAs$ (3.16 c).

C'est donc l'anisotropie de la bande de valence qui détermine l'anisotropie magnétique de $(Ga, Mn)As$. L'introduction de la couche tampon $InGaAs$ réduit la symétrie cubique et crée une anisotropie uniaxiale avec un axe facile suivant la direction de croissance.

Conclusion générale

La spintronique et un domaine qui cherche à développer des matériaux pour la manipulation du spin de l'électron. L'intégration d'éléments magnétiques dans des semi-conducteurs permet de développer une nouvelle classe de matériaux : les semi-conducteurs magnétiques dilués. Ce sont des matériaux projetés pour être à la base de composants reliant dans leur fonctionnement, à la fois la charge et le spin des électrons. Le travail de ce mémoire fait partie de la caractérisation des matériaux du domaine de la physique de la matière dense. La méthode utilisée est $FP-LMTO$ (full potential linearized muffin tin orbitals) exécutée dans un code de calcul M-studio Mindlab. Il s'inscrit dans le cadre d'un projet de fin d'étude pour la préparation d'un Master en physique des matériaux. Le travail est basé sur un calcul théorique exécuté dans la cadre de la théorie de densité fonctionnelle (DFT), pour la caractérisation des propriétés structurales électroniques et magnétiques de couches minces semi-conductrices à base de $GaMnAs/InGaAs$. Une super cellule de huit atomes est adoptée dans les calculs, pour estimer les différentes concentrations choisies pour les deux couches cristallines. En première partie le travail s'est axé sur un rappel des fondamentaux sur les DMS notamment le $Ga_{1-x}Mn_xAs$, un matériau prometteur dans le domaine de la spintronique. Une description de la technique utilisée dans le calcul et les différentes étapes et approximations adoptées sont aussi illustrées. En deuxième partie le travail s'est focalisé sur l'analyse des résultats obtenu par le calcul ab initio, dans une étude de la sensibilité de la dégénérescence dans la structure des bandes d'énergie à des paramètres contrôlant à la fois les propriétés magnétiques et électroniques des matériaux.

Nous avons commencé par extraire les propriétés structurales et électroniques après avoir optimisé les structures zinc blende des composés binaires (de $GaAs$, $MnAs$ et $InAs$) et des alliages ternaires de la couche magnétique $GaMnAs$ et la couche tampon de $InGaAs$. Nous avons constaté que la constante de maille de ces matériaux ainsi que le gap énergétique dépend de la concentration et de la position de l'atome de Manganèse en site interstitiel et substitutionnel et même des arsenics en site gallium. La structure de bande montre qu'il s'agit d'un semi-conducteur à gap direct, même si les valeurs de l'énergie de gap ne sont pas prédites de manière fiable à cause de déficience connue

de la DFT à prédire un état aussi excité que le gap d'énergie. Aussi, nous avons pu observer la différence entre les approximations utilisées dans le calcul ; la GGA sur-estime les valeurs de paramètre de maille par rapport à la LDA et $LSDA$. L'utilisation de la $LSDA$ donne des structures de bande doublées et c'est parce qu'elle est dépendante du spin. Il ressort aussi de l'étude des propriétés magnétiques à l'aide du calcul de la densité d'état en utilisant l'approximation $LSDA$. Dans ce système, il y a une asymétrie entre la population des états de spin up et celle de spin down de Manganèse pour des faibles concentrations. Ce qui confirme que l'introduction de l'atome de Manganèse dans la matrice de $GaAs$ fait apparaitre une phase ferromagnétique.

L'introduction de l'indium dans la couche tampon intermédiaire entre le substrat et la couche magnétique dans le ($GaMnAs/InGaAs$) permet d'introduire une contrainte de tension provoquant un désaccord de paramètre de maille cristalline entre la couche magnétique et la couche tampon. Celle-ci entraine en plus un éclatement des bandes énergétiques dans le haut de la bande valence, menant à une levée de dégénérescence entre les bandes des trous lourds et de trous légers. Un modèle théorique est utilisé pour l'estimation de l'écart énergétique entre ces bandes. L'analyse montre que les bandes des trous lourds sont décalées vers le haut et les bandes des trous légers vers le bas, l'écart, de quelques dizaines d'électron volts, est proportionnel à la contrainte qui est de son côté proportionnelle au taux d'indium introduit dans la couche tampon. Le travail effectué s'inscrit dans le domaine de la caractérisation des matériaux, il ouvre la voie à de nouvelles perspectives dans la recherche fondamentale des matériaux et leur incorporation technologique.

Bibliographie

[1] Albert Fert. Les débuts de la spintronique-travaux précurseurs et magnétorésistance géante. *Reflets de la physique*, (15) :5–10, 2009.

[2] Bernard Dieny. Faits marquants en spintronique depuis la découverte de la magnétorésistance géante. *Reflets de la physique*, (16) :6–11, 2009.

[3] Arnaud Bournel. Composants pour la spintronique, la microélectronique ultime et la nanoélectronique. *Habilitation à Diriger les Recherches, Université Paris-Sud*, 2006.

[4] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S Das Sarma. Spintronics : Fundamentals and applications. *Reviews of modern physics*, 76(2) :323, 2004.

[5] C Ertler, A Matos-Abiague, M Gmitra, M Turek, and J Fabian. Perspectives in spintronics : magnetic resonant tunneling, spin-orbit coupling, and gamnas. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 129, page 012021. IOP Publishing, 2008.

[6] Albert Fert, Jean-Marie George, Henri Jaffrès, Richard Mattana, and Pierre Seneor. The new era of spintronics. *Europhysics news*, 34(6) :227–229, 2003.

[7] Pierrick Balestrière. *Dynamique de l'aimantation assistée par un champ électrique dans des dispositifs à base de (Ga, Mn) As*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2011.

[8] Teruya Shinjo. *Nanomagnetism and spintronics*. Elsevier, 2013.

[9] É Trémolet de Lacheisserie. Magnétisme : Matériaux et applications, tome ii de collection grenoble sciences. *EDP Sciences*, 2000.

[10] Agnès Barthélémy, Albert Fert, and Frédéric Petroff. Giant magnetoresistance in magnetic multilayers. *Handbook of magnetic materials*, 12 :1–96, 1999.

[11] Gary A Prinz. Magnetoelectronics applications. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 200(1) :57–68, 1999.

[12] Jagadeesh S Moodera and Patrick LeClair. Spin electronics : A quantum leap. *Nature materials*, 2(11) :707–708, 2003.

[13] Jagadeesh Subbaiah Moodera, Lisa R Kinder, Terrilyn M Wong, and R Meservey. Large magnetoresistance at room temperature in ferromagnetic thin film tunnel junctions. *Physical review letters*, 74(16) :3273, 1995.

[14] Jose Maria De Teresa, Agnes Barthelemy, Albert Fert, Jean Pierre Contour, François Montaigne, and Pierre Seneor. Role of metal-oxide interface in determining the spin polarization of magnetic tunnel junctions. *Science*, 286(5439) :507–509, 1999.

[15] Gary A Prinz. Magnetoelectronics. *Science*, 282(5394) :1660–1663, 1998.

[16] Evgeny Y Tsymbal, Oleg N Mryasov, and Patrick R LeClair. Spin-dependent tunnelling in magnetic tunnel junctions. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 15(4) :R109, 2003.

[17] Chando Park Jian-Gang (Jimmy) Zhu. Magnetic tunnel junctions. *Materials Todayr*, 9(11) :36–45, November 2006.

[18] Jean-Pierre Nozières. Têtes de lecture et mémoires magnétiques. *Reflets de la physique*, (18) :12–16, 2010.

[19] Albert Fert. The cnrs has attributed this year's" medaille d'or"(golden medal) to the physicist albert fert. *CNRS Rress release*, 2003.

[20] Jérémy Alvarez-Hérault. *Mémoire magnétique à écriture par courant polarisé en spin assistée thermiquement*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2010.

[21] Jason Heidecker. Mram technology status. 2013.

[22] Sébastien Bandiera. *Jonctions tunnel magnétiques à anisotropie perpendiculaire et écriture assistée thermiquement*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2011.

[23] Erwan Gapihan. *Mémoire magnétique à écriture assistée thermiquement à base de FeMn*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2011.

[24] Jianbai Xia, Weikun Ge, and Kai Chang. *Semiconductor spintronics*. World scientific, 2012.

[25] Soumia Lardjane. *Étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du semiconducteur magnétique dilué : ZnO dopé au cobalt*. PhD thesis, Université de Technologie de Belfort-Montbeliard ; Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen, 2013.

[26] Sanghoon Lee, J-H Chung, Xinyu Liu, Jacek K Furdyna, and Brian J Kirby. Ferromagnetic semiconductor gamnas. *Materials Today*, 12(4) :14–21, 2009.

[27] Tomasz Dietl, H Ohno, F Matsukura, J Cibert, and D Ferrand. Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors. *science*, 287(5455) :1019–1022, 2000.

[28] Richard Mattana. *Transport polarisé en spin dans des nanostructures semiconductrices*. PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI, 2003.

[29] Houmed Mohamed Garad. *L'anisotropie magnétique perpendiculaire induite par oxydation et recuit thermique : de la structure au magnétisme*. PhD thesis, Grenoble, 2012.

[30] Alain Marty. *Structure et propriétés magnétiques de couches minces des alliages métalliques*. PhD thesis, Université Joseph-Fourier-Grenoble I, 2005.

[31] H Ohno, D Chiba, F Matsukura, T Omiya, E Abe, T Dietl, Y Ohno, and K Ohtani. Electric-field control of ferromagnetism. *Nature*, 408(6815) :944–946, 2000.

[32] Laura Thevenard. *Etude des propriétés ferromagnétiques de (Ga, Mn) As par le biais de l'hydrogène*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2007.

[33] LARBI KAHAL. *Etude des Propriétés Electroniques des Matériaux Ferromagnétiques*. PhD thesis, USTO, 2011.

[34] Alexandre Dourlat. *Propriétés magnétiques statiques et dynamiques de couches minces de GaMnAs à anisotropie perpendiculaire*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2008.

[35] Teyri AMAROUCHE. *Propriété magnétiques et électroniques «spintronique» des matériaux magnétiques*. PhD thesis, Université Mouloud Maameri de Tizi Ouzou.

[36] A Shen, H Ohno, F Matsukura, Y Sugawara, N Akiba, T Kuroiwa, A Oiwa, A Endo, S Katsumoto, and Y Iye. Epitaxy of (ga, mn) as, a new diluted magnetic semiconductor based on gaas. *Journal of Crystal Growth*, 175 :1069–1074, 1997.

[37] Llewellyn H Thomas. The calculation of atomic fields. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 23, pages 542–548. Cambridge Univ Press, 1927.

[38] Enrico Fermi. Statistical method to determine some properties of atoms. *Rend. Accad. Naz. Lincei*, 6 :602–607, 1927.

[39] K Louzazna and A Haroun. Electronic and magnetic structure of multilayered co x= 1, 3, 5 on pd 5 (111) systems. *Journal of applied physics*, 97(8) :083906, 2005.

[40] Eberhard KU Gross and Reiner M Dreizler. *Density functional theory*, volume 337. Springer Science & Business Media, 2013.

[41] Helmut Eschrig. *The fundamentals of density functional theory*, volume 32. Springer, 1996.

[42] Michael Springborg. *Methods of electronic-structure calculations*. Wiley Chichester, 2000.

[43] Klaus Capelle. A bird's-eye view of density-functional theory. *arXiv preprint cond-mat/0211443*, 2002.

[44] Max Born. Born-oppenheimer approximation. *Ann. Phys*, 84 :457–484, 1927.

[45] Pierre Hohenberg and Walter Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B) :B864, 1964.

[46] Walter Kohn and Lu Jeu Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A) :A1133, 1965.

[47] Axel D Becke. Perspective : Fifty years of density-functional theory in chemical physics. *The Journal of chemical physics*, 140(18) :18A301, 2014.

[48] Lars Hedin and Bengt I Lundqvist. Explicit local exchange-correlation potentials. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 4(14) :2064, 1971.

[49] John P Perdew and Alex Zunger. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Physical Review B*, 23(10) :5048, 1981.

[50] SH Vosko and L Wilk. Influence of an improved local-spin-density correlation-energy functional on the cohesive energy of alkali metals. *Physical Review B*, 22(8) :3812, 1980.

[51] John P Perdew and Yue Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45(23) :13244, 1992.

[52] Jianmin Tao, John P Perdew, Viktor N Staroverov, and Gustavo E Scuseria. Climbing the density functional ladder : Nonempirical meta–generalized gradient approximation designed for molecules and solids. *Physical Review Letters*, 91(14) :146401, 2003.

[53] Axel D Becke. Density-functional thermochemistry. ii. the effect of the perdew–wang generalized-gradient correlation correction. *The journal of chemical physics*, 97(12) :9173–9177, 1992.

[54] John P Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18) :3865, 1996.

[55] Delphine Cabaret. Xanes : approche monoélectronique. *Ecole thématique du CNRS Aussois*, 2006.

[56] John C Slater. Electronic structure of alloys. *Journal of Applied Physics*, 8(6) :385–390, 1937.

[57] US DOE Office of Science Member of US DOE Computational Material Science Network. Bandlab library documentation, 2017.

[58] O Krogh Andersen. Linear methods in band theory. *Physical Review B*, 12(8) :3060, 1975.

[59] KERROUM Djamel Eddine. *Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des chalcopyrites CuInX2 (X= S, Se, Te)*. PhD thesis, Université Mohamed Boudiaf des sciences et de la technologie d'Oran, 2013.

[60] 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. *Applied Physics Letters*, 69(3) :363–365, 1996.

[61] Alan G Thompson, JE Rowe, and M Rubenstein. Preparation and optical properties of inas1- x p x alloys. *Journal of Applied Physics*, 40(8) :3280–3288, 1969.

[62] A Continenza, S Picozzi, WT Geng, and AJ Freeman. Coordination and chemical effects on the structural, electronic, and magnetic properties in mn pnictides. *Physical Review B*, 64(8) :085204, 2001.

[63] VG Tyuterev and Nathalie Vast. Murnaghan's equation of state for the electronic ground state energy. *Computational Materials Science*, 38(2) :350–353, 2006.

[64] R Gaudoin and WMC Foulkes. Ab initio calculations of bulk moduli and comparison with experiment. *Physical Review B*, 66(5) :052104, 2002.

[65] FD Murnaghan. The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9) :244–247, 1944.

[66] T Jungwirth, Jairo Sinova, J Mašek, J Kučera, and AH MacDonald. Theory of ferromagnetic (iii, mn) v semiconductors. *Reviews of Modern Physics*, 78(3) :809, 2006.

[67] M Sawicki, F Matsukura, A Idziaszek, T Dietl, GM Schott, C Ruester, C Gould, G Karczewski, G Schmidt, and LW Molenkamp. Temperature dependent magnetic anisotropy in (ga, mn) as layers. *Physical Review B*, 70(24) :245325, 2004.

[68] Hakjoon Lee, Sunjae Chung, Sanghoon Lee, X Liu, and JK Furdyna. Temperature dependence of magnetization in gamnas film with critical strain. *Solid State Communications*, 149(31) :1300–1303, 2009.

[69] Wei Li, Markus Pessa, and Jari Likonen. Lattice parameter in ganas epilayers on gaas : Deviation from vegard's law. *Applied Physics Letters*, 78(19) :2864–2866, 2001.

[70] KT Jacob, Shubhra Raj, and L Rannesh. Vegard's law : a fundamental relation or an approximation ? *International Journal of Materials Research*, 98(9) :776–779, 2007.

[71] Yu-Jun Zhao, WT Geng, AJ Freeman, and B Delley. Structural, electronic, and magnetic properties of α-and β-mnas : Lda and gga investigations. *Physical Review B*, 65(11) :113202, 2002.

[72] Janusz Sadowski and JZ Domagala. Influence of defects on the lattice constant of gamnas. *Physical Review B*, 69(7) :075206, 2004.

[73] J Mašek, J Kudrnovskỳ, and F Máca. Lattice constant in diluted magnetic semiconductors (ga, mn) as. *Physical Review B*, 67(15) :153203, 2003.

[74] Philip J Hasnip, Keith Refson, Matt IJ Probert, Jonathan R Yates, Stewart J Clark, and Chris J Pickard. Density functional theory in the solid state. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 372(2011) :20130270, 2014.

[75] James E Bernard and Alex Zunger. Optical bowing in zinc chalcogenide semiconductor alloys. *Physical Review B*, 34(8) :5992, 1986.

[76] S-H Wei, LG Ferreira, James E Bernard, and Alex Zunger. Electronic properties of random alloys : Special quasirandom structures. *Physical Review B*, 42(15) :9622, 1990.

[77] GP Srivastava, José Luis Martins, and Alex Zunger. Atomic structure and ordering in semiconductor alloys. *Physical Review B*, 31(4) :2561, 1985.

[78] Yen-Kuang Kuo, Bo-Ting Liou, Sheng-Horng Yen, and Han-Yi Chu. Vegard's law deviation in lattice constant and band gap bowing parameter of zincblende in x ga 1- x n. *Optics Communications*, 237(4) :363–369, 2004.

[79] Sinem Erden Gulebaglan, Emel Kilit Dogan, Murat Aycibin, Mehmet Nurullah Secuk, Bahattin Erdinc, and Harun Akkus. The bowing parameters of caχmg1-χo ternary alloys. *Journal of Modern Physics*, 5(15) :1546, 2014.

[80] Félix Bertaut. L'énergie électrostatique de reseaux ioniques. *J. phys. radium*, 13(49) :505, 1952.

[81] RR Pelá, M Marques, Luiz Guimaraes Ferreira, J Furthmüller, and LK Teles. Gamnas : Position of mn-d levels and majority spin band gap predicted from gga-1/2 calculations. *Applied Physics Letters*, 100(20) :202408, 2012.

[82] Kozo Osamura, Shigehisa Naka, and Yotaro Murakami. Preparation and optical properties of ga1- x in x n thin films. *Journal of Applied Physics*, 46(8) :3432–3437, 1975.

[83] B-T Liou, S-H Yen, and Y-K Kuo. Vegard's law deviation in band gap and bowing parameter of al x in 1-x n. *Applied Physics A : Materials Science & Processing*, 81(3) :651–655, 2005.

[84] Gustavo M Dalpian, Su-Huai Wei, XG Gong, Antônio JR da Silva, and A Fazzio. Phenomenological band structure model of magnetic coupling in semiconductors. *Solid state communications*, 138(7) :353–358, 2006.

[85] Benjamin Salles. *Propriétés magnétiques, électriques et structurales et transport polarisé en spin dans des structures hybrides MnAs-GaAs*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2010.

[86] YU Burenkov. Temperature dependence of the elastic constants of gaas. *Soviet Physics-Solid State*, 15(6) :1175–1177, 1973.

[87] N Desbiens, E Bourasseau, JB Maillet, and C Denoual. Calcul de constantes élastiques de matériaux solides par simulations monte carlo. *Universit Paris-Saclay, ENS Cachan, Rapport LRC, Fvrier*, 2009.

[88] Janusz Sadowski, R Mathieu, P Svedlindh, M Karlsteen, J Kanski, Y Fu, JT Domagala, W Szuszkiewicz, B Hennion, DK Maude, et al. Ferromagnetic gamnas/gaas superlatticesâĂŤmbe growth and magnetic properties. *Thin Solid Films*, 412(1) :122–128, 2002.

[89] J Sadowski, R Mathieu, P Svedlindh, JZ Domagała, J Bak-Misiuk, K Świątek, M Karlsteen, J Kanski, L Ilver, H Åsklund, et al. Structural and magnetic properties of gamnas layers with high mn-content grown by migration-enhanced epitaxy on gaas (100) substrates. *Applied Physics Letters*, 78(21) :3271–3273, 2001.

[90] J Daeubler, S Schwaiger, M Glunk, M Tabor, W Schoch, R Sauer, and W Limmer. Gamnas on ingaas templates : Influence of strain on the electronic and magnetic properties. *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 40(6) :1876–1878, 2008.