

M1530.028

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur
Université de Guelma

Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études
Deuxième Année Master



Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Présenté par :

Fareh Assia

Etude ab-initio des semi-conducteurs magnétiques dilués

Sous la Direction de :

Dr. Bourouis Chahrazed

Juin 2014

A mon père

A ma mère

A mes frères Adel, Zinou et mes sœurs Radhia, Chahra, Zeneb

A mon mari

A ma belle famille

A toute ma famille sans oublier mes cousines Sara, Rima, loubna, samia, Saliha, Souma

A ma chère amie Sara Kerfef.

A toutes mes collègues surtout Saida et Yasmina.

Fareh Assia

Table des matières

INTRODUCTION GÉNÉRALE.....	1
BIBLIOGRAPHIE	4
CHAPITRE I.....	5
LES SEMICONDUCTEURS MAGNETIQUES DILUES (DMS)	5
1.1. INTRODUCTION.....	5
1.2. CLASSIFICATION DES SEMICONDUCTEURS MAGNETIQUES	6
1.2.1. SEMI-CONDUCTEURS OU LES ELEMENTS MAGNETIQUES FORMENT UN RESEAU PERIODIQUE	6
1.2.2. SEMI-CONDUCTEURS OU LES ELEMENTS MAGNETIQUES SUBSTITUENT ALEATOIREMENT LES CATIONS (DMS)	6
1.2.2.1. Les DMS à base des semi-conducteurs IV	7
1.2.2.2. Les DMS à base des semi-conducteurs IV-VI	7
1.2.2.3. Les DMS à base des semi-conducteurs III-V	7
1.2.2.4. Les DMS à base des semi-conducteurs II-VI	8
1.2.2.5. La famille de semi-conducteurs magnétiques à base des chalcopyrites	8
1.3. AVANTAGES DES DMS A BASE DES SEMI-CONDUCTEURS II-VI	9
1.4. SEMICONDUCTEURS ET IMPURETES MAGNETIQUES.....	9
1.4.1. LES METAUX DE TRANSITIONS	9
1.4.2. ELECTRON 3D	10
1.4.3. LES DMS A BASE DE CHROME.....	10
1.4.4. LES DMS A BASE DE FER.....	11
1.4.5. LES DMS A BASE DE COBALT.....	11
1.4.6. LES DMS A BASE DE VANADIUM OU DE NICKEL.....	11
1.4.7. LES DMS A BASE DE MANGANESE	11
1.5. ORIGINE DU FERROMAGNETISME.....	12
1.5.1. INTERACTIONS MAGNETIQUES MISES EN JEU	12
1.5.1.1. Interactions entre ions magnétiques porteurs délocalisés	12
1.5.1.2. Interactions magnétiques (double échange et super échange)	13
1.5.1.2.1. Double échange.....	13
1.5.1.2.2. Super échange	14
1.5.1.3. Le mécanisme RKKY.....	15
1.6. SEMI-CONDUCTEURS FERROMAGNETIQUE ET TEMPERATURE DE CURIE	16
1.7. LES SEMI-CONDUCTEURS MAGNETIQUES DILUES II-VI A BASE DE ZNTE	18
1.7.1. LES CARACTERISTIQUES DE ZNTE.....	18
1.7.2.1. Etudes expérimentales et calculs ab-initio des DMS à base de ZnTe	18
1.8. CONCLUSION	20
CHAPITRE II	21

LA METHODE AB INITIO : LMTO.....	21
II.1. INTRODUCTION.....	21
II.2. APPROXIMATION DE BORN OPPENHEIMER.....	22
II.3. THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE (DFT).....	22
II.3.1. PRINCIPES.....	22
II.3.2. THEOREMES DE HOHENBERG ET KOHN.....	23
II.3.3. LES EQUATIONS DE KOHN-SHAM.....	24
II.3.4. LA FONCTIONNELLE D'ECHANGE-CORRELATION.....	25
II.3.4.1 Approximation de la densité locale (LDA).....	25
II.3.4.2 Approximation du gradient généralisé (GGA).....	26
II.3.5. RESOLUTION DES EQUATIONS DE KOHN-SHAM.....	27
II.4. LA METHODE LMTO (LINEAR MUFFIN-TIN ORBITALS).....	28
II.4.1. INTRODUCTION.....	28
II.4.2. LA METHODE DES ORBITALES MUFFIN-TIN LINEAIRES (LMTO).....	29
II.4.2.1. Base de la méthode LMTO.....	29
II.5. CONCLUSION.....	34
BIBLIOGRAPHIE.....	35
CHAPITRE III.....	38
III.1. INTRODUCTION.....	38
III.2. ETUDE DU BINAIRE ZNTE EN PHASE ZINC BLENDE.....	38
III.2.1. DETAILS DE CALCULS.....	38
III.2.2. TEST DE CONVERGENCE.....	39
III.2.3. PROPRIETES STRUCTURALES.....	41
III.2.4. PROPRIETES ELECTRONIQUES.....	43
III.2.4.1. Structure de bandes d'énergie.....	43
III.2.4.2. Les densités d'états (DOS).....	45
III.3. ETUDE DES SEMI-CONDUCTEURS MAGNETIQUES DILUES Zn _{0.75} Mn _{0.25} Te et Zn _{0.75} Cr _{0.25} Te.....	48
III.3.1. DETAIL DE CALCUL.....	48
III.3.2. STRUCTURES DE BANDES D'ENERGIE.....	50
III.3.3. DENSITE D'ETAT ELECTRONIQUE (DOS).....	52
III.3.4. PROPRIETES MAGNETIQUES.....	55
III.3.5. CONCLUSION.....	56
BIBLIOGRAPHIE.....	57
CONCLUSION GENERALE.....	58

Abstract:

The aim of this work is to study the electronic structure and magnetic properties of the diluted magnetic semiconductors (DMS) of family IIVI. For this, we use the full potential linearized Muffin Tin Orbital (FPLMTO). First, we use the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA) to investigate the structural and electronic properties of zinc-blend phase of pure ZnTe. We show that our calculated values were in good agreement with values reported in the literature. Then, we calculated the results for ZnMnTe and ZnCrTe, We used a $1 \times 1 \times 1$ supercell containing 8 atoms, where Zn atom were substituted by Manganese or Chrome at a concentration of $x=25\%$. We found that the two materials were in a ferromagnetic state and we investigated the origin of the ferromagnetism. We studied also the behaviour of both the total and local magnetic moments.

Keywords: Diluted magnetic semiconductors, ZnTe, Electronic structure, magnetic properties, FPLMTO, DFT.

Résumé:

Le but de ce travail est d'étudier la structure électronique et les propriétés magnétiques du semi-conducteur dilué (DMS) de la famille IIVI. Pour cela, nous avons utilisé la méthode des orbitales de Muffin-Tin (PFLMTO). Premièrement, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour étudier les propriétés structurales et électroniques du ZnTe pur dans la phase blende de zinc. Les résultats obtenus sont en bon accord avec des valeurs rapportés dans la littérature.

Dans une deuxième partie, nous avons étudié les propriétés des composés ZnMnTe et ZnCrTe en utilisant une supercellule de 8 atomes ($1 \times 1 \times 1$) dans laquelle un atome de Zn ont été substitués par un atome de Manganèse ou Chrome avec une concentration de 25%. Nous avons trouvé que les matériaux présentaient des phases ferromagnétiques. Nous avons également étudié les variations du moment magnétiques totales et locale.

Mots clés : semi-conducteurs magnétiques dilués, ZnTe, structure électronique, propriétés magnétiques, FPLMTO.

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة البنية الإلكترونية و الخواص المغناطيسية لانصاف النواقل II-VI باستعمال طريقة مدرات مافن تين. اولاً استعملنا التقريبتين LDA و GGA في دراسة الخواص البنوية الإلكترونية المركب النقي ZnTe في الصيغة zinc-lendb. تحصلنا على نتائج موافقة للنتائج التجريبية و النظرية الأخرى. بعد ذلك قمنا بدراسة خواص المركبين ZnMnTe و ZnCrTe وذلك باستعمال خلية بها 8 ذرات ($1 \times 1 \times 1$) حيث تم استبدال ذرة Zn مرة ب: Mn ومرة Cr. كما قمنا بدراسة تغيرات كل من العزم المغناطيسي.

الكلمات المفتاحية: DMS, البنية الإلكترونية, الخواص المغناطيسية, FPLMTO, DFT.

Introduction générale

1

*"Where shall I begin, please your Majesty?" he asked.
"Begin at the beginning," the King said, very gravely,
"and go on till you come to the end: then stop."*

Lewis Carroll

Les semiconducteurs magnétiques dilués (DMS) font actuellement l'objet de recherches actives en raison de leurs propriétés magnétiques intéressantes. Comprendre l'origine du magnétisme de ces matériaux se révèle crucial pour être en mesure de mieux contrôler et ajuster des paramètres expérimentaux pour les applications technologiques (électronique de spin) : ceci motive l'étude approfondie des propriétés microscopiques de tels systèmes, pour lesquels la simulation à l'échelle atomique se révèle particulièrement un outil de choix.

En effet, à l'opposé des expériences qui partent de grandes échelles pour regarder de plus en plus dans le détail, l'approche théorique nous fait partir des constituants atomiques pour remonter aux propriétés macroscopiques. C'est dans cette optique, qu'on a entrepris l'étude ab initio des aspects structuraux et magnétiques des métaux de transition Fe, Co et Mn dans une matrice ZnTe.

L'électronique de spin, domaine de recherche en forte expansion, est né de la découverte du couplage d'échange entre deux couches ferromagnétiques séparées par une couche non magnétique en 1986 par Grunberg [1], et à la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) dans des multicouches Fe/Cr [2] en 1988 par deux équipes indépendantes, celle d'Albert Fert de l'université de Paris Sud-Orsay, et celle de Peter Grunberg du centre de recherche de Julich en Allemagne (Prix nobel 2007) [1].

Depuis, un grand effort a été mobilisé dans le but de contrôler le spin pour l'utiliser comme un vecteur d'information ou un moyen de stockage non volatile d'information. Le principe de ce nouveau type d'électronique réside dans l'utilisation du spin de l'électron, en plus de sa charge électrique. Les applications sont attendues dans le domaine des mémoires magnétiques (MRAM) [3], le stockage des données à ultra haute densité, et à plus long terme dans la conception de nouveaux composants électronique. Cette nouvelle branche de l'électronique, ouvre des portes à des applications nouvelles, sans pour autant modifier totalement la technologie bien maîtrisée.

La possibilité de combiner, la fonction de stockage et de reconfiguration (à travers l'élément magnétique), à la fonction de manipulation et d'amplification (à travers l'élément semi-conducteur), devrait ouvrir la voie à une génération de composants électroniques ou optoélectroniques «intelligents» combinant des fonctions de mémoire, de traitement logique et de communication sur une même puce. Mais les progrès ont été assez lents dans ce domaine, en raison de la difficulté d'injecter efficacement des spins d'un métal vers un semiconducteur, à cause de la grande différence de densité de porteurs dans les deux matériaux.

Aujourd'hui, les efforts portent sur la réalisation de nouveaux composants hybrides alliant propriétés magnétiques et propriétés semiconductrices. Les recherches intensives dans ce domaine ont déjà permis la réalisation et la commercialisation de dispositifs tels que des têtes de lectures de disques durs et de mémoires magnétiques. En 2006, les premières mémoires magnétiques non volatiles MRAM (Magnetic Random Access Memory), avec une capacité de stockage de 4 Mo et 16 Mo en 2010, ont été fabriquées par Freescale. Même si la capacité de stockage dans les MRAM reste faible, des résultats récents révélés par Hitachi montrent qu'il est possible d'augmenter considérablement la densité d'informations en stockant 2 bits par cellule élémentaire. Ces travaux prouvent que l'électronique de spin a déjà franchi le stade des perspectives vers celui de l'intégration dans l'électronique moderne.

Cependant, pour envisager sérieusement des applications, il est maintenant indispensable de trouver des semi-conducteurs ferromagnétiques pouvant fonctionner à la température ambiante.

Les semiconducteurs magnétiques dilués présentant un comportement magnétique à température ambiante font actuellement l'objet d'études très intensives tant sur le plan expérimental que théorique. L'élaboration de ce type de matériaux consiste à introduire des éléments magnétiques (Fe, Co, Ni, Mn) dans un semiconducteur. Ces ions en substitution

peuvent interagir par l'intermédiaire des porteurs pour aboutir à un ordre ferromagnétique, mais les températures de mise en ordre restent assez basses, et la recherche d'une phase semiconductrice ferromagnétique à température ambiante en vue d'applications à grande échelle constitue l'un des défis actuels de l'électronique de spin.

Le présent travail s'intéresse aux propriétés du ZnTe dopé par des métaux de transitions 3d (Fe, Co, Mn). On a choisit de mener nos recherches dans le cadre du formalisme de la fonctionnelle de la densité DFT, qui fait partie actuellement des méthodes ab-initio les plus aptes à décrire efficacement les systèmes à base de métaux de transition.

En, effet, les simulations quantiques permettent aujourd'hui d'explorer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de la matière sans avoir recours aux connaissances expérimentales a priori des systèmes étudiés. L'absence de paramètres empiriques dans les méthodes ab-initio, permet de plus à ces approches d'explorer la matière dans des conditions extrêmes inaccessibles à l'expérience. Leur caractère prédictif autorise finalement les simulations quantiques à proposer de nouveaux matériaux, dans l'attente d'une hypothétique synthèse expérimentale.

L'étude bibliographique nécessaire pour la réalisation de notre travail s'articule autour de deux chapitres :

- ❖ Le premier chapitre est consacré à la présentation bibliographique des différentes familles de semi-conducteurs magnétiques dilués et de leurs propriétés ainsi que les différents mécanismes physiques à l'origine du magnétisme dans ces matériaux.
- ❖ Dans le second chapitre, nous rappelons le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et le principe de la méthode d'orbitale Muffin-Tin linéaire LMTO.
- ❖ Enfin nous terminons par une conclusion générale.

Bibliographie

[1] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys. Rev. B, 39 (1989) 4828.

[2] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friedrich and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett., 61, p. 2472, (1988). "Giant magnetoresistance of (001) Fe/ (001)Cr magnetic superlattices".

[3] J. D. BOECK, W. VAN ROY, J. DAS, V. MOTSNYI, Z. LIU, L. LAGAE, H. BOEVE, K. DESSEIN, AND G. BORGHS, Semicond. Sci. Technol., 17, p. 342, (2002). "Technology and materials issues in semiconductorbased magnetoelectronics".

Les Semiconducteurs magnétiques dilués (DMS)

I.1. Introduction

Les semiconducteurs magnétiques dilués (DMS : diluted magnetic semiconductors) sont des matériaux semi-conducteurs classiques (II-VI, IV-VI, III-V, IV et II-IV-VI₂) dans lesquels une certaine quantité d'atomes non magnétiques du semi-conducteur hôte est substitué par des atomes portant un moment magnétique, par exemple des ions de la série des métaux de transition [1]. La combinaison des propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs avec les propriétés magnétiques d'un matériau ferromagnétique donne naissance à la possibilité d'intégrer dans un seul dispositif des fonctionnalités optiques, électroniques et magnétiques. C'est une des thématiques en plein essor dans le domaine de l'électronique de spin ou spintronique.

L'idée du magnétisme dans les semi-conducteurs n'est pas nouvelle. La question de savoir si la charge et le spin peuvent coexister dans le même matériau pour améliorer ses propriétés a été abordée depuis de nombreuses années. Les termes de semiconducteur magnétique dilué ou de semiconducteur semi-magnétique ont été employés à partir des années soixante lorsque ces semiconducteurs présentaient une phase magnétique verre de spin.

L'appellation "semiconducteur ferromagnétique" est apparue au début des années 90 lorsque les progrès des techniques d'élaboration ont permis d'incorporer une quantité plus importante d'éléments magnétiques dans les semi-conducteurs III-V et à partir du moment où ces semi-conducteurs présentaient une phase ferromagnétique clairement définie.

I.2. Classification des semiconducteurs magnétiques

Les semiconducteurs magnétiques peuvent être divisés en deux grandes familles distinctes: Les semiconducteurs où les éléments magnétiques forment un réseau périodique et les semiconducteurs magnétiques dilués où les éléments magnétiques sont repartis d'une manière aléatoire.

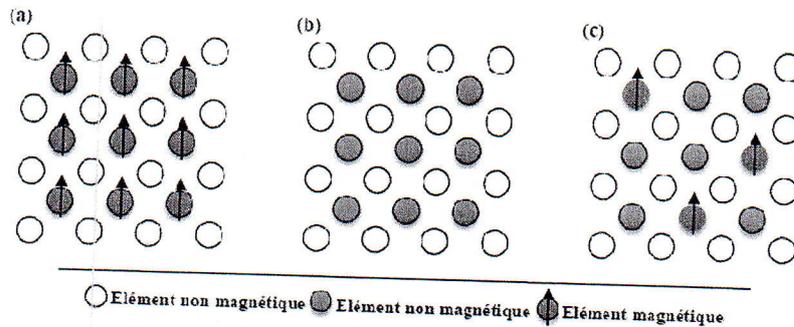


Figure I.1 : Classification des semiconducteurs magnétiques. (a) Semi-conducteurs où les éléments magnétiques forment un réseau périodique. (b) Semi-conducteurs traditionnels sans éléments magnétiques (c) Semi-conducteurs magnétiques dilués où les éléments magnétiques sont repartis d'une manière aléatoire (d'après H.Ohno [2]).

I.2.1. Semi-conducteurs où les éléments magnétiques forment un réseau périodique

Cette classe est constituée de matériaux semiconducteurs dans lesquels une grande quantité d'éléments magnétiques (métaux de transitions ou terres rares) 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 I.1.a) et donc une phase parfaitement définie. Ces matériaux sont parfois appelés CMS (Concentrated Magnetic Semiconductors).

Les principaux représentants de cette famille sont des chalcogénures de chrome (CdCr_2Se_4 , FeCr_2S_4) ou d'euporium (EuS , EuSe) et certains manganites [3]. Bien que certains de ces matériaux présentent des comportements ferromagnétiques et des températures de mise en ordre parfois supérieures à la température ambiante, la difficulté à les intégrer dans les filières existantes de la microélectronique (Si , GaAs) rend leur intérêt limité.

I.2.2. Semi-conducteurs où les éléments magnétiques substituent aléatoirement les cations (DMS)

En fonction de la matrice semi-conductrice hôte nous distinguerons plusieurs types de DMS (figure I.1.c) : Le type III-V où l'on trouve entre autre le GaMnAs et le InMnAs , le type

IV à base de Si ou de Ge dopés au Cr, Mn, Ni ou Fe, le type IV-VI comme le $Pb_{1-x-y}Sn_xMn_yTe$ et les II-VI, par exemple ZnTMO et CdTMTe (TM = ion de la série des métaux de transition). De nombreux autres oxydes semiconducteurs sont également beaucoup étudiés tel que le TiO_2 , SnO_2 et HfO_2 [3].

I.2.2.1. Les DMS à base des semi-conducteurs IV

Les semi-conducteurs IV (Si, Ge) ont été les derniers à investir le champ d'étude des semi-conducteurs magnétiques dilués. Pourtant la potentielle compatibilité avec la technologie silicium en fait des candidats privilégiés. Leur sous-représentation dans le monde des DMS tient probablement aux difficultés à y étudier la polarisation en spin des porteurs par des moyens optiques à cause des gaps indirects du silicium et du germanium. De plus, l'utilisation des semiconducteurs IV a généralement pour conséquence la formation de composés métalliques (siliciures, germaniures).

I.2.2.2. Les DMS à base des semi-conducteurs IV-VI

Ces matériaux ont une très grande densité de porteurs, suffisante pour que les interactions ferromagnétiques qu'ils véhiculent soient plus fortes que l'antiferromagnétisme. La possibilité de contrôler l'apparition d'une phase ferromagnétique par la densité de porteurs est connue dans $Pb_{1-x-y}Sn_xMn_yTe$ depuis 1986 [4]. Toutefois ces matériaux ne sont pas compatibles avec ceux constituant l'électronique moderne, car leur structure cristallographique est trop différente.

I.2.2.3. Les DMS à base des semi-conducteurs III-V

Les DMS III-V (essentiellement dopés au manganèse) font l'objet de nombreux travaux. Le premier composé étudié en couche mince fut l'arséniure d'indium dopé au Mn. Le groupe de H. Ohno a reporté en 1989 l'existence d'une phase homogène d' $In_{1-x}Mn_xAs$ ferromagnétique [5], puis ils ont montré en 1992 que le ferromagnétisme était induit par les trous [6]. Ces deux publications ont encouragé de nombreux groupes à étudier les semi-conducteurs III-V dopés au Mn et notamment le composé $Ga_{1-x}Mn_xAs$ qui fait l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques depuis 1996 [7]. Mais la température de Curie est la limitation majeure de ces DMS. En effet, la température observée la plus élevée

qui est celle du GaMnAs élaboré par épitaxie par jet moléculaire (MBE) n'est que de l'ordre de 173 K. Dans les DMS III-V composés de manganèse, les ions magnétiques divalents Mn^{2+} sont accepteurs. Le couplage ferromagnétique véhiculé par les porteurs est dominant. Le caractère magnétique et le dopage sont totalement liés, ce qui constitue un inconvénient pour l'étude et la compréhension de ces systèmes.

I.2.2.4. Les DMS à base des semi-conducteurs II-VI

Les DMS II-VI, essentiellement tellurure et sélénure, dopés au manganèse, au fer ou au cobalt ont été intensivement étudiés au cours des années 70-80. Les propriétés magnétiques de ces DMS II-VI sont dominées par les interactions de super-échange antiferromagnétiques entre les spins localisés. Ceci induit un caractère paramagnétique, antiferromagnétique ou verre de spin selon la concentration d'ions magnétiques incorporés. Les progrès des techniques de croissance et notamment le meilleur contrôle du dopage de ces semiconducteurs ont permis de mettre en évidence une phase ferromagnétique induit par les porteurs (trous) itinérant [8]. Actuellement les études se concentrent préférentiellement sur les propriétés magnétique, électrique et optique d'hétéro-structure (par exemple puits quantiques) et sur les semi-conducteurs ferromagnétiques à température ambiante ($Zn_{1-x}Co_xO$, $Zn_{1-x}Cr_xTe$).

I.2.2.5. La famille de semi-conducteurs magnétiques à base des chalcopyrites

Une autre famille de semiconducteurs magnétiques, plus "exotiques", sont les chalcopyrites. A ce jour, uniquement des résultats pour les matériaux massifs ($Zn_{1-x}Mn_xGeP_2$ et $Cd_{1-x}Mn_xGeP_2$) ont été reportés ($T_c \sim 310K$).

Parmi ces différentes familles de semiconducteurs magnétiques, les chalcogénures ne semblent pas être pour le moment de bons candidats pour la réalisation de dispositifs en raison notamment de la difficulté d'élaborer ces matériaux et de leurs faibles températures de Curie.

Les chalcopyrites présentent l'avantage d'avoir des températures Curie supérieures à 300K mais ces composés sont difficilement incorporables dans les structures IV ou II-IV. Cependant, ces chalcopyrites ont la particularité de posséder une phase ferromagnétique pour des composés de type n ou p.

Les semiconducteurs où l'on incorpore des impuretés magnétiques semblent plus attrayants pour leurs intégrations dans des hétérostructures semiconductrices. En effet, les

semiconducteurs magnétiques II-VI présentent l'avantage d'une meilleure compatibilité avec les structures semiconductrices traditionnelles IV (matériaux de base de l'électronique actuelle) et III-V (matériaux utilisés pour les technologies de pointes et notamment les dispositifs à hautes fréquences).

I.3. Avantages des DMS à base des semi-conducteurs II-VI

Les DMS à base des semi-conducteurs II-VI sont très présents dans les recherches sur l'électronique de spin grâce à plusieurs avantages :

Ces matériaux sont compatibles avec les technologies actuelles de la microélectronique: par exemple, on peut intégrer une couche d'aligneur de spin à base de séléniures sur un dispositif préexistant en GaAs.

Ils disposent quelques avantages intrinsèques : grand temps de vie (jusqu'à 100 ns) des porteurs polarisés permettant leur transport sur plusieurs centaines de nanomètres, forte efficacité dans la polarisation et l'injection de spins, localisation des porteurs au sein d'hétérostructures dans des puits quantiques ou des boîtes quantiques.

Ajoutons à cela toutes les possibilités qu'ouvre l'ingénierie de bande sur ces matériaux : ajustement du gap, du paramètre de maille, des contraintes, en fonction des besoins.

Ces matériaux ont également quelques propriétés magnétiques intéressantes ; Bien évidemment, l'existence d'une phase ferromagnétique au-delà de la température ambiante est importante. Citons encore le fait que l'importance de leur facteur de Landé, qui quantifie le couplage entre les propriétés de spin et le champ magnétique extérieur, assure un splitting Zeeman conséquent. Les propriétés dépendantes du spin, telles que la rotation de Faraday géante sont ainsi amplifiées, et un champ magnétique assez faible peut suffire pour polariser totalement les porteurs au niveau de Fermi.

I.4. Semiconducteurs et impuretés magnétiques

I.4.1. Les métaux de transitions

Différents éléments de transition (Cr, Mn, Fe, Co, Ti, V) ont été incorporés dans des semi-conducteurs (IV, II-VI, III-V, chalcopyrites). Ces derniers sont les éléments chimiques couvrant les groupes allant des colonnes IIIb à IIb (ou colonnes 3a à 12) dans la classification périodique. Tous ces éléments ont des configurations d'orbitales électroniques similaires, et

donc des propriétés chimiques voisines. La caractéristique principale des métaux de transition est de présenter une couche d'orbitales d incomplète. Les 5 orbitales d se remplissent progressivement par acquisition de 1 à 10 électrons, selon une des règles de Hund. En général, les éléments de transition ont des densités et des températures de fusion élevées. En outre, ils présentent des propriétés magnétiques et peuvent former des liaisons ioniques et covalentes avec les anions. Ces matériaux présentent aussi des températures de Curie élevées ($> 1000K$) et une polarisation de spin relativement importante à la température ambiante ($\approx 40\%$).

I.4.2. électron 3d

Les éléments de transitions présentent une couche 3d incomplète, qui a pour conséquence l'existence de moment magnétique localisés. Les éléments 3d des ions magnétiques ne forment pas de bande séparée à cause de leur manque de recouvrement. Par contre, ils peuvent modifier les propriétés électroniques des bandes du fait de leur hybridation avec les états p de la bande de valence. La couche 3d se sépare en niveau $3d\uparrow$ entièrement occupé et un niveau $3d\downarrow$ vide ou partiellement rempli, selon le type de l'ion de transition (Mn, Fe, Co). Le champ cristallin scinde chacun des deux niveaux en un doublet e_g et un triplet t_{2g} . Il ya alors hybridation entre les états t_{2g} de l'ion magnétique et les états p de la bande de valence. Par contre, cette hybridation n'influence que très faiblement les niveaux e_g . La différence entre les métaux de transition apparait dans la variation des énergies des états e_g et t_{2g} , cette variation résulte d'une occupation différente des niveaux 3d.

I.4.3. Les DMS à base de chrome

Le chrome est sans doute l'élément le plus utilisé après le Mn. Il a été incorporé dans les semi-conducteurs IV, II-VI et III-V. Parmi les semi-conducteurs IV, on peut se référer aux travaux de Choi et al. [9]. Ils ont élaboré des monocristaux de germanium dopé au Cr (1%) et ont reporté des températures de Curie de l'ordre de 125K. Cependant la présence d'une phase secondaire ferromagnétique, dont la température de Curie est de l'ordre de 90K n'est pas à exclure. Le chrome a été aussi incorporé dans les semi-conducteurs III-V GaN, AlN et GaAs ; M. Yamada et al [10] ont élaboré le composé (Ga, Cr) As avec des concentrations de chrome de 3% à 26%. La température de Curie de ces composés reste inférieure à la température ambiante. A. Dakhama et al. [11] ont reporté des températures de Curie de 10K,

la densité de porteurs des couches minces étant de l'ordre 10^{20} cm^{-3} . Plusieurs groupes ont réussi à incorporer du chrome dans des nitrures (monocristaux [12] et couches minces [13]) et ont observé une phase ferromagnétique à température ambiante.

I.4.4. Les DMS à base de fer

L'incorporation de fer dans des semi-conducteurs fait l'objet pour l'instant de peu de publications. On peut noter cependant les résultats concernant les semi-conducteurs SiC, GaN et ZnO. Theodoropoulou et al. [14] ont implanté des atomes de fer (5%) dans le semi-conducteur IV-IV SiC et ont mesuré une phase ferromagnétique jusqu'à 270K. Akinaga et al. [15] ont élaboré par épitaxie par jets moléculaires des couches de GaN dopées au fer. La température de Curie de ces couches n'excédait pas 100K (pour une concentration de fer de 10^{19} cm^{-3}). Han et al. [16] ont reporté une température de Curie de l'ordre de 550K pour le semi-conducteur ZnO dope au Fe et ont montré que l'introduction de cuivre comme dopant électrique (1%) augmentait considérablement le moment magnétique.

I.4.5. Les DMS à base de cobalt

Le cobalt a été essentiellement intégré dans des oxydes dont notamment le ZnO et le TiO_2 . Quelles que soient les méthodes d'élaboration (épitaxie par jets moléculaires, pulvérisation cathodique ou ablation laser), l'incorporation du cobalt, sans former d'agrégats métalliques, semble beaucoup plus délicate que pour les autres métaux [17]. Cependant plusieurs groupes ont reporté la présence d'une phase homogène de ZnO dopé au cobalt avec des T_c supérieures à la température ambiante [18]. Des températures de Curie supérieures à 300K ont été mesurées pour des couches de TiO_2 dopés au cobalt élaborées par ablation laser, par épitaxie par jets moléculaires (EJM) [19] ou pour des techniques combinatoires laser-EJM [20]. L'origine du ferromagnétisme des composés ZnO ou TiO_2 dopés Co reste encore à éclaircir.

I.4.6. Les DMS à base de vanadium ou de nickel

Ces métaux de transition ont été peu utilisés. On peut noter l'incorporation du nickel dans le semi-conducteur SiC ou la température de Curie est de l'ordre de 50K [14] et dans le GaN ou la T_c est de 185K [21]. Le ZnO dopé au vanadium, élaboré par ablation laser, possède une température T_c supérieure à 350K [22].

I.4.7. Les DMS à base de manganèse

Le manganèse est le métal de transition le plus utilisé, il a été incorporé dans les semi-conducteurs IV, II-VI, III-V et dans les chalcopyrites. C'est un métal de transition de la colonne VIIB de la classification périodique possédant deux électrons de valence sur une orbitale $4S^2$, ce qui lui permet de prendre la place d'un cation dans les semi-conducteurs magnétiques dilués. La différence importante entre le manganèse et les éléments de la colonne II est que l'orbitale $3d$ est à moitié pleine ($3d^5$). Les cinq électrons de cette orbitale ont, de par la règle de Hund, des spins parallèles. Ils ne participent pas aux liaisons covalentes, mais confèrent au manganèse un spin $5/2$. Parmi les semi-conducteurs IV, on peut noter les résultats obtenus pour le Ge dont les T_c sont de 285K pour des monocristaux [23] (115K pour des couches minces [24]). Le SiC a une T_c de 250K [14]. Les semi-conducteurs III-V dopés au Mn ont été intensivement étudiés. Pour le moment les nitrures et les phosphures sont les plus prometteurs. Les températures de Curie pour le GaN sont bien au dessus de 300K [25] tandis que pour le GaP, elles sont proches de 300K [26]. Enfin les chalcopyrites ont aussi des T_c proches de 300K mais pour l'instant uniquement pour des monocristaux [27].

I.5. Origine du ferromagnétisme

L'origine du ferromagnétisme est bien établie pour plusieurs semi-conducteurs ($Ga_{1-x}Mn_xAs$, $In_{1-x}Mn_xAs$ pour les III-V, $Cd_{1-x}Mn_xTe$ par exemple pour les II-VI), cependant elle est encore soumise à débat pour d'autres ($Ga_{1-x}Mn_xN$, $Zn_{1-x}Co_xO$).

Les semi-conducteurs ferromagnétiques peuvent être considérés comme un ensemble de deux systèmes électroniques, un contenant des électrons délocalisés (bande de valence ou de conduction) et un autre contenant les électrons des impuretés magnétiques avec un moment magnétique localisé.

I.5.1. Interactions magnétiques mises en jeu

I.5.1.1. Interactions entre ions magnétiques porteurs délocalisés

Les porteurs délocalisés dans un semiconducteur peuvent se situer soit dans la bande de conduction du semiconducteur intrinsèque (conduction de type n) soit dans sa bande de

valence (conduction de type p). La bande de conduction est essentiellement formée à partir des fonctions d'onde des cations et leur symétrie est celle des électrons « S ». La bande de valence est essentiellement formée à partir des fonctions d'onde anions (oxygène) et le haut de cette bande a ainsi une symétrie de caractère « p ».

Les ions magnétiques localisés sont des ions de la série des métaux de transition et les électrons "magnétiques" localisés sont des électrons d. Les interactions $s - d$ et $p - d$ vont donc caractériser le semiconducteur magnétique dilué.

L'Hamiltonien d'interaction peut s'écrire :

$$H_{ech} = \sum_{R_i} J(R_i - r) S_i \cdot s \quad (I.1)$$

Où S_i est le spin des ions magnétiques en position R_i et s le spin des porteurs délocalisés (en position r). J est l'intégrale d'échange entre les porteurs localisés et délocalisés. Dans l'hypothèse où les ions magnétiques sont localisés et délocalisés. Dans l'hypothèse où les ions magnétiques sont répartis aléatoirement dans la matrice semiconductrice, nous pouvons remplacer le spin S_i par sa moyenne $\langle S \rangle$. C'est l'approximation du champ moyen. Nous pouvons alors écrire l'hamiltonien d'échange entre les ions magnétiques et les porteurs délocalisés (de symétrie s ou p) comme suit :

$$H_{ech} = -\chi N_0 \alpha \langle S \rangle \cdot S \quad H_{ech} = -\chi N_0 \beta \langle S \rangle \cdot s \quad (I.2)$$

Porteurs dans la bande de conduction

Porteurs dans la bande de valence

Où χN_0 concentration des ions magnétiques $\langle S \rangle$ et s les moments magnétiques des ions de porteurs délocalisés respectivement. Les constantes d'échange α (interaction $s - p$) et β (interaction $p - d$) peuvent être positives (interaction ferromagnétique) ou négatives (interaction antiferromagnétique) β est généralement plus élevée (en valeur absolue) que α .

I.5.1.2. Interactions magnétiques (double échange et super échange)

Les interactions magnétiques qui se manifestent dans les oxydes sont essentiellement le double échange de Zener, le super échange et l'interaction RKKY (Ruderman - kittel - Kasuya - Yoshida), développée à partir du modèle de Zener du champ moyen.

I.5.1.2.1. Double échange

Jonker et Santen [28] ont observé, dans les manganites substitués, $\text{La}_{1-x}\text{D}_x\text{MnO}_3$, où D est un cation alcalino-terreux divalent, une forte corrélation entre le caractère métallique et ferromagnétique de certains de ces composés. Pour expliquer ceci, *Zener* [29], a proposé un mécanisme, appelé de «double échange», dans lequel il fait intervenir les ions oxygène pour assurer le transport des électrons entre les cations manganèse de charges 3^+ et 4^+ , qui sont séparés par une distance trop grande et pour lesquels, l'échange direct (cation-cation) est nul.

La configuration du système (figure. I.3), avant et après le transfert électronique, peut être décrite par les fonctions d'onde dégénérées $\psi_1: \text{Mn}^{3+} \text{O}^{2-} \text{Mn}^{4+}$ et $\psi_2: \text{Mn}^{4+} \text{O}^{2-} \text{Mn}^{3+}$. En raison de leur dégénérescence, plus exactes : $\psi_+ = \psi_1 + \psi_2$ et $\psi_- = \psi_1 - \psi_2$. L'énergie du système sera minimale lorsque l'orientation des spins des cations de manganèse voisins sera parallèle, conduisant ainsi à des interactions ferromagnétiques et, en même temps, à une délocalisation des électrons.

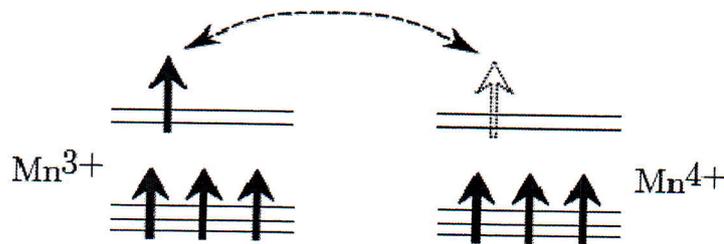


Figure I.2: Double échange.cas de deux ions Mn^{4+} et Mn^{3+} .

I.5.1.2.2. Super échange

L'antiferromagnétisme par interaction de super-échange a été mis en évidence pour des cristaux de LaMnO_3 [30]. Goodenough et al. [31] ont formalisé l'interaction de super échange, ce qui a donné lieu aux règles de Goodenough-Kanamori. Un ion de la série des métaux de transition se trouvant dans un champ cristallin de symétrie quadratique subit une levée de dégénérescence des niveaux électroniques 3d en deux groupes séparés par l'énergie du champ cristallin Δ . Dans le cas d'une symétrie octaédrique, le triplet de plus basse énergie est appelé t_{2g} et le doublet de plus haute énergie e_g . La Figure I.3 donne les différentes configurations cation-anion-cation à 180° . Dans le cas où les deux cations ont une orbitale e_g à moitié pleine pointant dans la direction de l'anion, ce qui donne naissance à un fort

antiferromagnétisme (cas 1 dans la Figure I.3). Le cas où les deux orbitales e_g sont vides (cas 2 dans la Figure I.3) donne également de l'antiferromagnétisme, mais faible. On peut imaginer que les électrons du cation ont une probabilité non nulle de se trouver sur l'orbitale vide e_g , et que cette probabilité est identique pour les deux cations, ainsi, nous retrouvons le cas 1, mais uniquement pendant un temps très bref, ce qui explique pourquoi l'interaction est faible. Par contre, dans le cas 3 de la Figure I.3, un des cations a une orbitale e_g à moitié pleine et l'autre vide. Dans ce cas, l'électron en question peut virtuellement passer d'un cation à l'autre à condition que les deux cations aient leurs spins parallèles. Ce passage virtuel donne naissance à l'interaction ferromagnétique faible.

Cas	Configuration Orbitale	Couplage par Super-échange
1		Couplage antiferromagnétique fort
2		Couplage antiferromagnétique faible
3		Couplage ferromagnétique faible

Cation	Description
	Orbitales t_{2g} remplies et une orbitale e_g à demi-remplie pointant dans la direction de l'anion.
	Orbitales t_{2g} remplies et une orbitale e_g vide pointant dans la direction de l'anion.

Anion	Description
	Orbitale $p\sigma$

Figure I.3 : Ordre magnétique en fonction du type d'orbitale des cations avoisinants. L'angle entre deux cations est fixé à 180° [14].

I.5.1.3. Le mécanisme RKKY

Le mécanisme RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya et Yoshida) a été introduit pour expliquer le ferromagnétisme dans les terres rares. En effet, dans ces matériaux, l'orbitale atomique non complètement pleine qui porte le moment magnétique est une orbitale profonde, et ainsi le modèle de ferromagnétisme pour les métaux de transition ne peut s'appliquer. Dans le mécanisme RKKY, le ferromagnétisme est expliqué par un couplage d'échange entre les électrons de conduction et le moment localisé porté par les orbitales 4f des terres rares. Dans ce modèle le signe du couplage dépend de la distance entre deux ions magnétiques,

alternativement ferromagnétique et antiferromagnétique. Ce modèle a ensuite été appliqué pour expliquer le couplage ferromagnétique/antiferromagnétique entre deux couches minces d'un métal ferromagnétique séparées par une couche mince d'un métal non-magnétique donnant lieu à un couplage ferrimagnétique ou antiferromagnétique entre les deux couches selon l'épaisseur de la couche non-magnétique. Dans le cas de semiconducteurs magnétiques dilués, la distance entre deux ions magnétiques est plus courte que la distance moyenne entre deux spins délocalisés, dans ce cas, l'interaction RKKY est identique au double-échange dans le modèle de Ziner. Cette interaction est à l'origine de la phase ferromagnétique des semiconducteurs (III, Mn) V à forte concentration de trous.

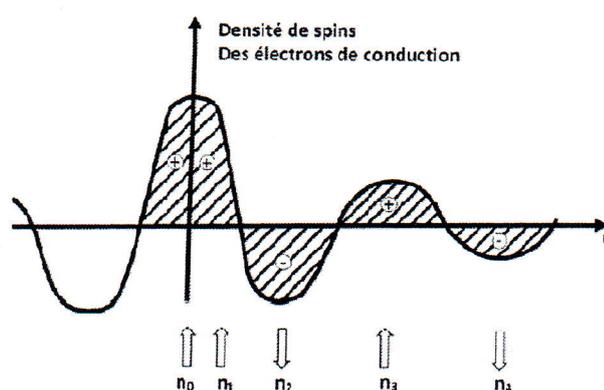


Figure I.4 : Représentation schématique de l'interaction d'échange indirect RKKY isotrope (+) et (-) représentent la polarisation des électrons de conduction en fonction de l'éloignement d de l'ion magnétique situé en site n_0 . \uparrow et \downarrow Représentent l'orientation des moments magnétiques

I.6. Semi-conducteurs ferromagnétique et température de Curie

La température de Curie pour les semi-conducteurs ferromagnétiques est proportionnelle à :

$$T_c \propto p^{1/3} N_0 \beta^2 \rho_s \quad (I.3)$$

Où p est la densité de trous, N_0 la concentration de sites cations, β est l'intégrale d'échange $p-d$ et ρ_s est la densité d'état de spin [32].

La figure I.3 représente les températures de Curie calculées pour les semi-conducteurs II-VI et III-V contenant 5% de manganèse et 2.5% de Mn pour les IV avec une densité de trous de $3.5 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

L'énergie d'échange étant inversement proportionnelle au cube du paramètre de maille, la température de Curie sera plus élevée pour les semi-conducteurs à anions légers ou le paramètre de maille est plus faible, dont par exemple les nitrures et phosphures. Le deuxième paramètre influant sur la température de Curie est la densité d'état ρ :

$$\rho(E_F) = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \hbar^2}$$

Ou m^* est la masse effective. Par conséquent la température de Curie sera élevée pour des masses effectives lourdes, c'est-à-dire pour les bandes les plus plates. Les semi-conducteurs à faible couplage spin-orbite auront aussi des T_c élevées.

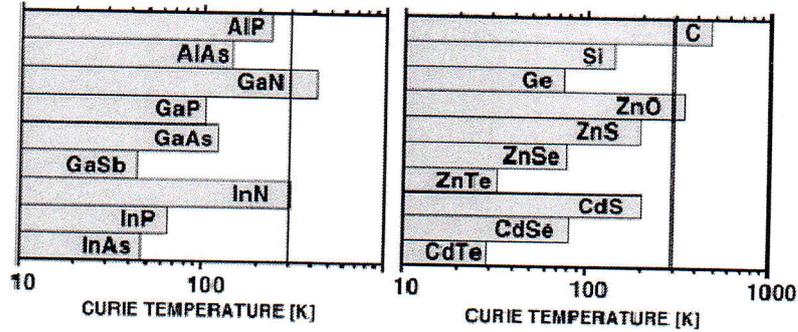


Figure. I.5: Température de Curie calculées pour des semi-conducteurs III-V (gauche), IV et II-VI(droite) contenant 5% de Mn de charge 2^+ et une densité de trous de $3.5 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$. D'après Dietl et al. [32].

Le déficit majeur de l'électronique de spin basée sur les semiconducteurs magnétiques dilués est d'atteindre des températures de Curie supérieures à la température ambiante en vue d'applications à grande échelle. Les recherches continuent dans ce sens pour avoir nouvelles matrices offrant une température de Curie supérieure à la température ambiante.

Des températures de Curie proche ou supérieures à la température ambiante ont été reportées pour les nitrures (GaN, AlN) et les phosphures (GaP). La T_c calculée pour les semi-conducteurs II-VI ZnO dopé au manganèse est supérieure à 300K. Cependant la présence d'une phase ferromagnétique à température ambiante n'a pas encore été observée expérimentalement.

Des prédictions théoriques ont permis d'orienter la recherche vers certains composés comme les calculs ab-initio qu'ont été réalisés sur (Zn,Cr)Te. Ces calculs prédisent :
des interactions de super-échange ferromagnétiques [33]
des interactions de double échange ferromagnétiques [34].

D'autre part, un comportement ferromagnétique avec une température de Curie de 275 K sur des couches minces de (Zn,Cr)Te dopées à 20% a été mis en évidence expérimentalement [17]. Ces couches étant très résistives, le ferromagnétisme induit par des porteurs peut être exclu. Les mécanismes responsables de ces propriétés n'ont pas encore été compris.

Contrairement aux matériaux du groupe III-V, il est plus aisé de contrôler les propriétés ferromagnétiques et semi-conductrices de façon indépendante dans les matériaux du groupe

II-VI puisque, dans ces derniers, les impuretés magnétiques n'apportent pas de porteurs. Compte tenu de la température critique relativement haute, mesurée pour $x = 20\%$ d'impuretés magnétiques, le composé $Zn_{1-x}Cr_xTe$ semble être prometteur pour la spintronique.

I.7. Les semi-conducteurs magnétiques dilués II-VI à base de ZnTe

Dans cette étude nous nous intéressons aux semiconducteurs magnétiques dilués à base de ZnTe. Ce matériau bénéficie d'avantages particuliers à la famille des semiconducteurs II-VI. En particulier, sa qualité cristalline est souvent excellente et sa bonne luminescence.

La partie suivante regroupe une présentation du ZnTe ainsi que le récapitulatif des premiers résultats expérimentaux et calculs ab initio réalisés sur les DMS à base de ZnTe.

I.7.1. Les caractéristiques de ZnTe

Le tellure de zinc (ZnTe) cristallise dans la structure cubique, précisément la structure Zinc blende, aussi appelée sphalérite avec un paramètre de maille $a = 6.08$ (Å). La maille de cette structure se compose de deux réseaux cubiques faces centrées, décalés d'un quart de la diagonale du cube. Le Zn possède 2 électrons de valence sur une orbitale s , alors que le tellure a 6 électrons de valence ($5s^2 5p^4$). Le ZnTe comportera donc des liaisons hybrides de type sp^3 où chaque anion se retrouve dans un environnement tétraédrique de cations, et inversement. Ces liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente.

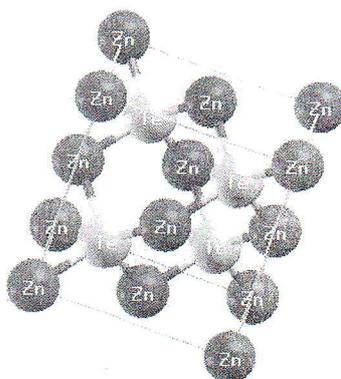


Figure I.6 : Maille blende de zinc du ZnTe de symétrie $F 43m$ (n° 216). Elle se compose de deux sous réseaux cubiques faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, et occupés l'un par l'anion (Te), et l'autre par le cation Zn.

I.7.2.1. Etudes expérimentales et calculs ab-initio des DMS à base de ZnTe

Dans les DMS II-VI (CdTe, ZnSe, ZnTe ...), les ions magnétiques sont isoélectriques. Donc, ils ne changent pas les propriétés électriques du semi-conducteur. Par conséquent, les propriétés magnétiques et le dopage sont alors découplés.

Les composés ZnTMTe (TM=Fe,Co,Mn) sont des composés très étudiés depuis une vingtaine d'années. En effet, dans ces matériaux, les atomes magnétiques (métaux de transition) présentent la même valence que les cations de la matrice (Zn) ce qui permet de les incorporer facilement en substitution de ces cations, sans modification des propriétés électriques. Ainsi, des calculs ont annoncé des solubilités de 86% du Mn dans les composés $Zn_{1-x}Mn_xTe$.

Parmi les semiconducteurs II-VI, H. Saito et al. [35] ont reporté la présence d'une phase ferromagnétique dans le composé ZnTe. La température de Curie est de l'ordre de 15K (pour 3.5% de chrome) et ce composé à une densité de trous de 10^{15} cm^{-3} . Cette température de Curie reste faible mais est tout de même supérieure aux semi-conducteurs II-VI dopés au Mn ou les T_c sont fréquemment inférieures à 4K.

En 2003, l'équipe de Saito a montré expérimentalement que le composé magnétique $Zn_{1-x}Cr_xTe$, avec une concentration $x \approx 20\%$ d'impuretés magnétiques, pouvait être ferromagnétique à la température ambiante [36]. En effet, pour cette concentration la température de Curie mesurée est $T_c \approx 300K$. Saito et ses collaborateurs ont également confirmé par des mesures magnéto-optiques l'existence d'une forte interaction « p-d » dans ce matériau. Il avait déjà été rapporté que ce composé est un semi-conducteur magnétique dilué présentant une interaction sp-d à la fois pour des échantillons massifs [37] et pour des films [38].

Les calculs ab initio confirment bien que la forte hybridation p-d entre les états 3d du chrome et 5p du tellure est responsable des couplages ferromagnétiques entre les spins localisés des impuretés magnétiques [39].

De nombreuses études de simulation sont menées sur les composés $Zn_{1-x}Cr_xTe$ du fait de leur caractère demi-métallique ferromagnétique.

En 2004, des calculs de premier principes ont confirmé que les composés $Zn_{1-x}Cr_xTe$ ($x=0.25, 0.50, 0.75$) sont des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques [40].

En 2007, des calculs de premier principes ont mis en évidence que $Cr_xZn_{1-x}Te$ ($x=0.0625, 0.125, 0.25, 0.35, 0.50$) sont des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques [41].

De récentes études ab initio ont montré la présence d'un caractère ferromagnétique demi-métallique dans certains autres composés DMS II-VI, ouvrant ainsi de nouvelles perspectives pour la recherche fondamentale et appliquée.

En 2008, des calculs de premier principes ont révélé le caractère ferromagnétiques et demi-métalliques dans les composés $Cd_{1-x}TM_xSe$ (Cr, V), $x=0.25, 0.50, 0.75$ [42].

En 2009, les composés $Zn_{1-x}Cr_xSe$ ($x=0.25, 0.50, 0.75$ et 1) ont aussi été caractérisés comme des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques [43].

Dans la littérature actuelle, les semi-conducteurs magnétiques dilués demi-métalliques à base de semiconducteurs du groupe II-VI à large gap dopés par Fe, Co et Ni sont devenus le point brûlant des recherches récentes. Des études de premier principes ont prouvé que ces composées sont des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques ; exemple : $Zn_{1-x}TM_xS$ (TM=Fe, Co, Ni) à $x=0.25$ [44], $Cd_{1-x}Co_xX$ (X=Se, Te) à $x=0.25$ [45], $Zn_{1-x}Cr_xS$ à $x=0.25$ [46] et $Zn_{1-x}Co_xX$ (X=S, Se, Te) [47].

I.8. Conclusion

Trouver un semi-conducteur dilué ferromagnétique à température ambiante et comprendre les mécanismes fondamentaux responsables de l'apparition de ce type de magnétisme est un défi majeur à soulever. Au vu des différentes possibilités de matériaux susceptibles d'être ferromagnétiques à température ambiante, les DMS à base de ZnTe semble être un candidat prometteur pour la spintronique.

Bibliographie

- [1] J. Kossut, W. Dobrowolski, *Diluted Magnetic Semiconductors, Handbook of Magnetic Materials*, K. H. J. Buschow, ed., 7 (1993) 231, North-Holland.
- [2] H. Ohno, *Science*, 281 (1998) 951.
- [3] P. Wachter, *Critical Reviews in Solid State Sciences*, (19712) 189.
- [4] T. Story, R.R. Galazk, R.B. Frankel, et al. *Phys. Rev.Lett*, 56:77, 1986.
- [5] H. Munekata, H. Ohno, S Von Molnar, et al. *Phys.Rev Lett*, 63,(1989)1849.
- [6] H. Ohno, H. Munekata, T. Penny, et al. *Phys. Rev. Lett*, 68, (1992) 2664.
- [7] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, et al. *Appl.Phys. Lett*, 69, (1996)363.
- [8] A. Haury, A. Wasiela, A. Arnoult, et al. *Phys. Rev.Lett.*, 79, (1997) 511.
- [9] S. Choi, S.C. Hong, S. Cho, Y. Kim, et al. *Appl. Phys. Lett*, 81, (2002) 3606.
- [10] M. Yamada, K. Ono, M. Mizuguchi, J. Okabayashi, et al, *J. Appl. Phys.*, 91, (2002)7908.
- [11] A. Dakhama, B. LakshmiA, and D. Heiman, *Phys. Rev. B*, 67, p. 115204, (2003).
- [12] S. E. Park, H.-J. Lee, Y. C. Cho, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 80, p. 4187, (2002).
- [13] S. Y. Wu, H. X. Liu, L. Gu, R. K. Singh, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 82, (2003)3047.
- [14] N. Theodoropoulou, et al, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 4, p. 119, (2001).
- [15] H. Akinga, S. Nemeth, J. DE Boeck, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 77, (2000) 4377.
- [16] S.-J. Han, J. W. Song, C.-H. Yang, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 81, (2002) 4212.
- [17] J. H. Kim, H. Kim, D. Kim, Y. E. Ihm, and W. K. Choo, *J. Appl. Phys.*, 92,(2002) 6066.
- [18] K. Ueda, H. Tabata, and T. Kawai, *Appl. Phys. Lett*, 79, (2001) 988.
- [19] S. A. Chambrs, S. Thevuthasan, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 82, (2003)1257.
- [20] Y. Matsumoto, M. Murkami, T. Shono, et al. *Science*, 291,(2001) 854.
- [21] S. J. Pearton, M. E. Overberg, G. Thaler, et al. *J. Vac.Sci. Technol. A*, 20, (2002)721.
- [22] H. Saeki, H. Tabata, and T. Kawai, *Solid State communications*, 120, (2001) 439.

- [23] S. Cho, S. Choi, S. C. Hong, Y. Kim, J. B. et al. Phys. Rev. B, 66, (2002) 033303.
- [24] Y. D. Park, A. T. Hanbicki, S. C. Erwin, et al. Science, 295, (2002) 651.
- [25] G. T. Thaler, M. E. Overberg, B. Gila, et al. Appl. Phys. Lett., 80, (2002) 3964.
- [26] M. L. Reed, N. A. El-Masry, et al. Appl. Phys. Lett., 79, (2001) 3473.
- [27] N. Theodoropoulou, A. F. Hebard, et al. Phys. Rev. Lett., 89, (2002) 107203.
- [28] G. H. Jonker et J. H. van Santen, Physica, 16, 337 (1950).
- [29] C. Zener, Phys. Rev. 83, 299 (1951).
- [30] J. B. Goodenough, A. Wold, R. J. Arnot et N. Menyuk. Phys. Rev., 124; (1961) 373.
- [31] T. Dietl, H. Ohno and F. Matsukura, Phys. Rev. B, 63, p. 195205, (2001).
- [32] J. Blinowski, P. Kacman, and J. A. Majewski, Physical Review B, 53 9524 (1996).
- [33] K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Semic. Science and Technology, 17 367 (2002).
- [34] H. Saito, V. Zayets, Y. Suzuki, and K. Ando, J. Appl. Phys., 91, p. 8085, (2002).
- [35] H. Saito, V. Zayets, S. Yamagata, and K. Ando, Phys. Rev. B, 66, p. 081201, (2002).
- [36] K. Sato, P. H. Dederichs, H. K. Yoshida, Europhys. Lett, 61(2003) 403.
- [37] W. Mac, A. Twardowski, M. Demianiuk, Phys. Rev. B, 54, (1996) 5528.
- [38] K. Ando, A. Twardowski, in Proceedings of the 23rd International Conference Physics of Semiconductors, Berlin (World Scientific, Singapore), (1996) 285.
- [39] Q. Wang, Q. Sun, P. Jena, Y. Kawazoe, J. Appl. Phys, 97 (2005) 043904.
- [40] W.-H. Xie, B.-G. Liu, J. Appl. Phys, 96 (2004) 3559.
- [41] Y Liu and B-G Liu, J. Phys. D: Appl. Phys, 40 (2007) 6791.
- [42] C.-W. Zhang et al. Computational Materials Science 43 (2008) 710.
- [43] X.-f. Ge, Y.-m. Zhang, J. Magn. Mang. Mater, 321 (2009) 198.
- [44] Y. Saeed, S. Nazir, Ali H. Reshak, A. Shaukat, J. Allo. Comp, 508 (2010) 245.
- [45] Y. Saeed, S. Nazir, A. Shaukat, A.H. Reshak, J. Magn. Magn. Mate, 322 (2010) 3214.
- [46] S. Nazir, N. Ikram, S.A. Siddiqi, Y. Saeed, A. Shaukat, Ali Hussain Reshak, Current Opinion in Solid State and Materials Science 14 (2010) 1.
- [47] C. Ouyang, Z. Xiong, Q. Ouyang, G. Liu, Z. Ye, M. Lei, Chin. Phys. 15 (2006) 1585.

Tableau III.2 : Valeurs des énergies des bandes interdites de la phase zinc-blend du ZnTe calculées par LDA et GGA.

	E_g (eV)
Notre travail :	
LDA	1.24454
GGA	2.15276
Autres résultats :	2.1345 ^a 1.16 ^b
Résultats expérimentaux	2.38 ^c

^a : Référence [10], ^b : Références [11], ^c : Références [8]

III.1.4.2. Les densités d'états (DOS)

La densité d'états électronique est une grandeur essentielle pour calculer la distribution d'énergie d'électrons dans les bandes de conduction et de valence. Pour déterminer la nature de la structure électronique de bandes, nous avons calculé les densités d'états (DOS) totales et partielles de ZnTe dans la phase zinc-blende.

Les figures III.7 et III.8 illustrent les densités d'états totales et partielles projetée entre -13 et 13 eV obtenues par la GGA et la LDA de ce composé.

Nous remarquons que les DOS obtenues avec les deux approximations sont très similaires. Pour les états inoccupés, on peut remarquer que les bandes de conduction sont moins décalées vers les énergies les plus basses.

Pour cette structure, la densité d'état totale présente trois régions dans la bande de valence : une partie inférieure des bandes de valence dominée par les états *s* de Te, une partie plus supérieure dominée par les états *3d* des cations Zn, et le haut de la bande de valence constituée par les états *p* des anions Te principalement et les états *p* de Zn.

Le minimum de la bande de conduction dans les deux approximations est constitué principalement par les états *4s* du cation Zn.

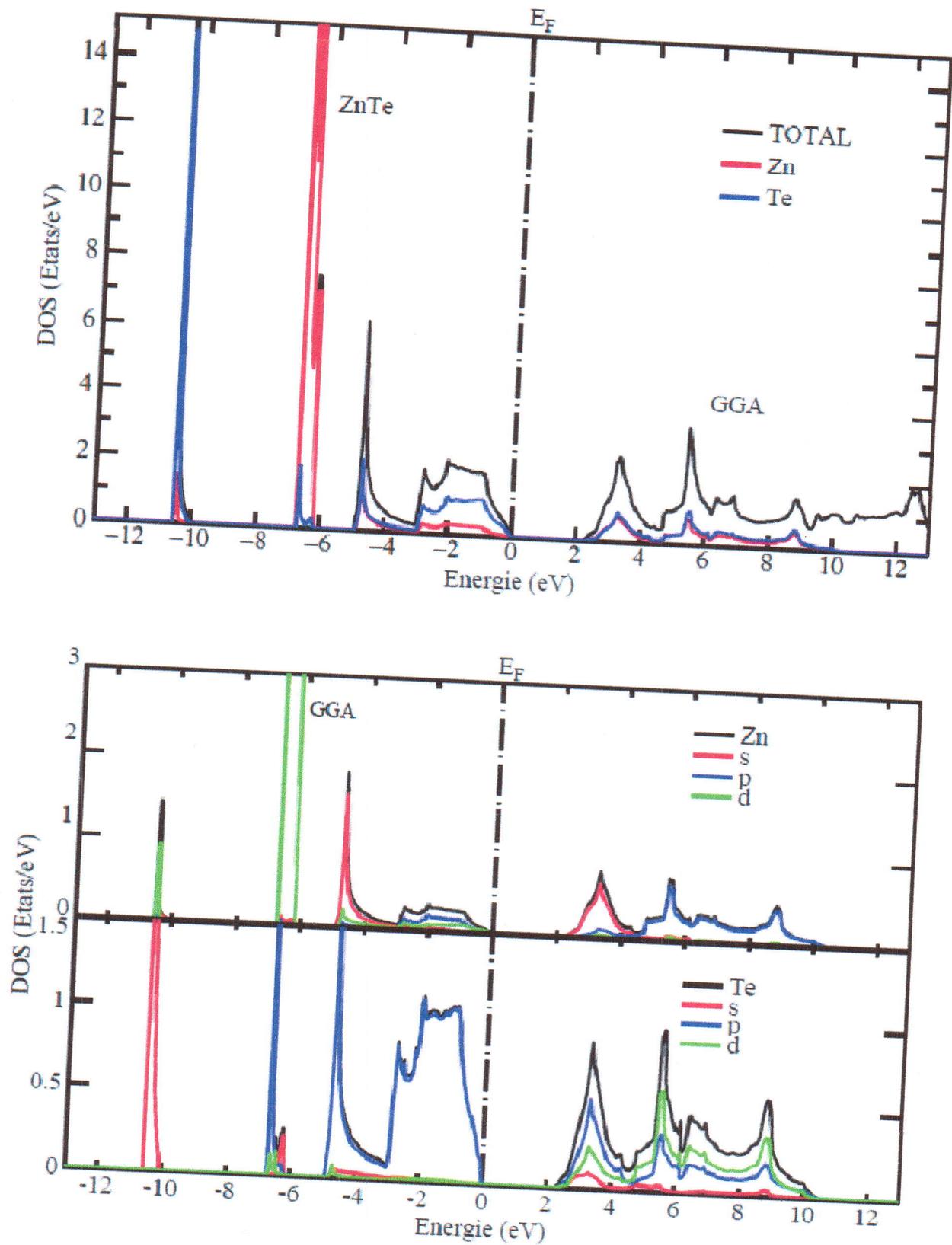


Figure III.7 : Courbes de densités d'états électroniques totales et partielles du ZnTe dans la phase zinc-blende, obtenues par GGA.

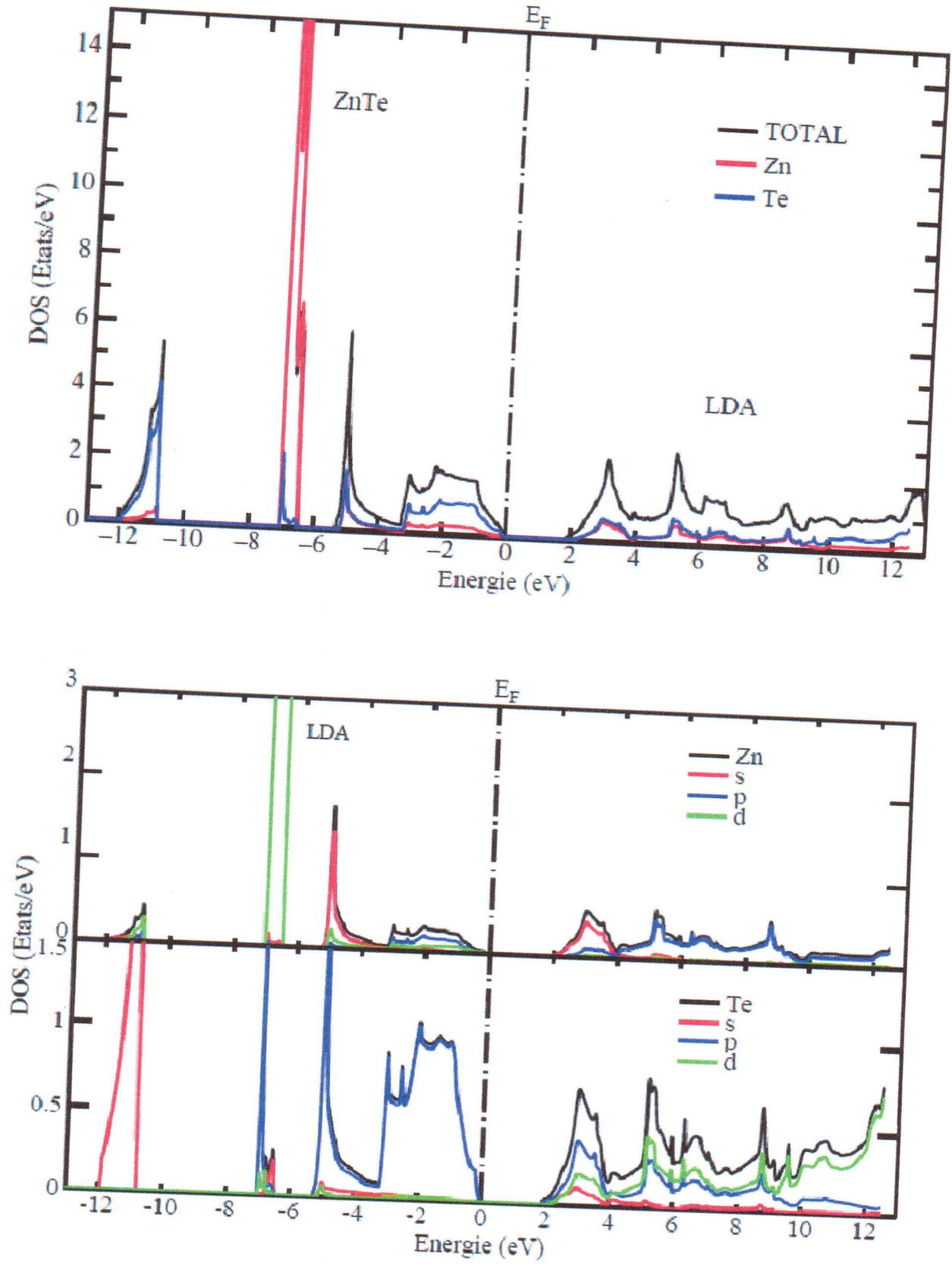


Figure III.8 : Courbes de densités d'états électroniques totales et partielles du ZnTe dans la phase zinc-blende, obtenues par LDA.

III.3. Etude des semi-conducteurs magnétiques dilués $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

Afin de voir l'influence du dopage de Mn et de Cr sur les propriétés électroniques et magnétiques du ZnTe, en considérant une l'impureté magnétique en position substitutionnelle de Zn; nous calculons ensuite les propriétés électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

III.3.1. Détail de calcul

Dans la deuxième partie de notre travail nous avons effectué des calculs dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité polarisée en spin (SDFT) en conjonction avec l'approche de la supercellule et en adoptant l'approximation du gradient généralisé GGA paramétrisée Perdew, Berke et Erenzehof et avec l'échange de Becke [3] pour le potentiel d'échange et de corrélation. Les effets relativistes sont pris en compte dans l'approximation scalaire, en négligeant le couplage spin-orbite.

Notre étude consiste à étudier le dopage du ZnTe par le Mn ou le Cr. Pour cela nous avons utilisé la phase zinc de blende (B3) du ZnTe avec un groupe d'espace $F\bar{4}3m$ ($n= 216$) dans laquelle l'atome de Zn est situé à (0, 0, 0) et l'atome Te à (0.25, 0.25, 0.25) pour construire une super-cellule standard $1 \times 1 \times 1$ de ZnTe dans la phase zinc de blende à symétrie cubique.

La supercellule ($1 \times 1 \times 1$) de ZnTe contenant 8 atomes où seulement un atome de Zn sur le site vertex est substitué par un atome de Mn ou par un atome de Cr (soit un dopage substitutionnel de 25 %), sans changer les positions des 3 autres atomes de Zn ni celles de Te. De cette façon, nous obtenons une structure cubique avec le groupe d'espace $P\bar{4}3m$ (no 215).

Les phases $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ ainsi construites sont ferromagnétiques et ordonnées, par définition; par ce que la super-cellule contient uniquement un seul atome de Mn ou de Cr et le cristal infini est construit par la répétition de cette supercellule, par conséquent tous les atomes de Mn ou de Cr ont les mêmes atomes voisins et possèdent le même spin.

Dans nos calculs nous avons traité les états Zn ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$), Te ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$), Mn ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$) et Cr ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$) comme étant des états de coeur, et les états Zn ($3d^{10} 4s^2$), Te ($5s^2 5p^4$), Mn($3d^5 4s^2$) et Cr ($3d^4 4s^2$) comme étant des états de valence.

L'échantillonnage de la zone de Brillouin a été réalisé avec une grille de $12 \times 12 \times 12$ points k gamma centrée suivant la méthode de Monkhorst et Pack [12]. Le nombre de points k, dans la

première zone de Brillouin irréductible (IBZ) qui assure la convergence est de 84 et l'énergie est calculée avec une précision de 10^{-7} eV.

Les paramètres de maille utilisés dans nos calculs sont déterminés par la loi de Vegard. Les composé ternaire $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ sont constitués des molécules ZnTe avec une fraction molaire x et une fraction $(1-x)$ des molécules MnTe et CrTe respectivement. Ainsi, la constante de réseau d'un ternaire peut être exprimée comme une combinaison linéaire des constantes de réseau des deux alliages binaires qui le constituent suivant la loi de Vegard [13].

$$a_{Zn_{1-x}Mn_xTe} = xa_{MnTe} + (1-x)a_{ZnTe} \quad (III.3)$$

$$a_{Zn_{1-x}Cr_xTe} = xa_{CrTe} + (1-x)a_{ZnTe} \quad (III.4)$$

Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau III.3.

Tableau III.3 : Valeurs de la constante du réseau a_0 (Å) des composés $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

Le composé	a_0 (Å)	a_{vegard} (Å)
ZnTe	6.089 ^a	
MnTe	6.03 ^a	
CrTe	6.10 ^a	
$Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$		6.07
$Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$		6.09

^a : Référence [8]

III.3.2. Structures de bandes d'énergie

Dans un semi-conducteur non magnétique, la bande de valence dérive simplement des fonctions d'onde des cations et des anions comme nous l'avons vu pour le cas de ZnTe pur. Pour les DMS, l'introduction d'une impureté magnétique donne naissance à des interactions magnétiques ce qui modifie la structure de bande et la densité d'états du semiconducteur.

Les Figure III.8. et Figure III.9. représentent les structures de bandes électroniques calculées pour les composés $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ le long des différentes lignes de plus haute symétrie dans la zone de Brillouin en utilisant le concept des électrons à spin-up et spin down séparément.

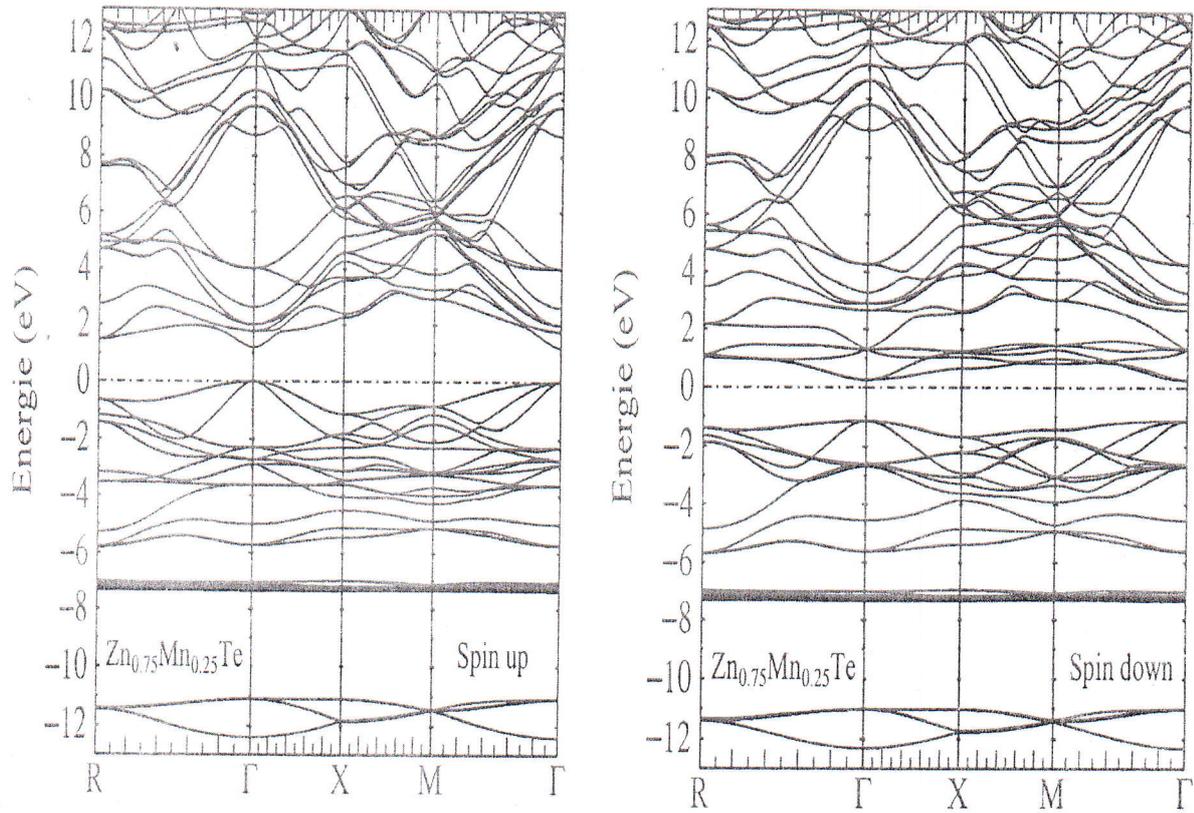


Figure III.8. : Structure de bandes d'énergie polarisées en spin du composé $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$.

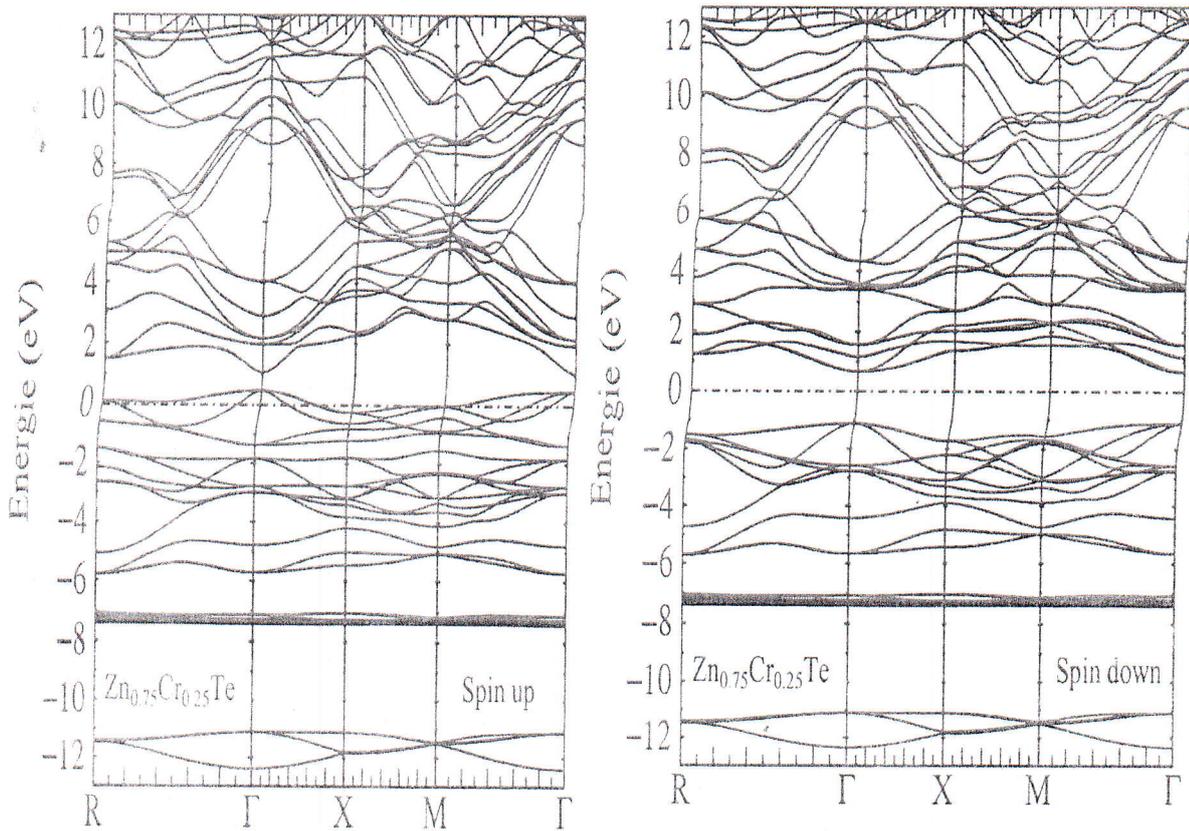


Figure III.9. : Structure de bandes d'énergie polarisées en spin du composé $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

III.3.3. Densité d'état électronique (DOS)

Pour déterminer le caractère des composés $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ et la nature de la distribution des électrons dans les bandes de valence et de conduction, nous avons calculé les densités d'états électroniques totale et partielle de ces derniers. On tenant compte de la polarisation du spin afin de déceler le caractère magnétique éventuel.

Les résultats sont illustrés dans les figures III.10 et III.11. Le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies. Le caractère ferromagnétique est observé pour cette structure ; ceci est visible grâce à la non symétrie des états de spins up et les états de spins down (la différence entre les densités des états up et down n'est pas nulle).

On remarque aussi, une absence des états de spin up et de spin down au niveau de Fermi, ce qui révèle un caractère semi-conducteur ferromagnétique au $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$. Ceci est en très bon accord avec les résultats théoriques de A.E. Merad et al. [14].

Il est bien appréciable que les états vides au niveau de Fermi pour les états en spin down correspondent aux états $3d$ du manganèse.

Cependant, lorsqu'un atome de Zn est remplacé par un atome de Cr les DOS des électrons à spin-up et à spin-down sont significativement modifiées au niveau de Fermi.

La remarque la plus importante est la présence d'états électroniques au niveau de Fermi dans la DOS des électrons à spin-up alors que le caractère semi-conducteur est préservé dans la DOS des électrons à spin-down. Ce qui signifie que le semiconducteur magnétique dilué $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ présente un caractère demi-métallique, ce qui conduit à une polarisation en spin complète (100%) au niveau de Fermi. Ceci est en bon accord avec les résultats théoriques de S. Amari et al [15].

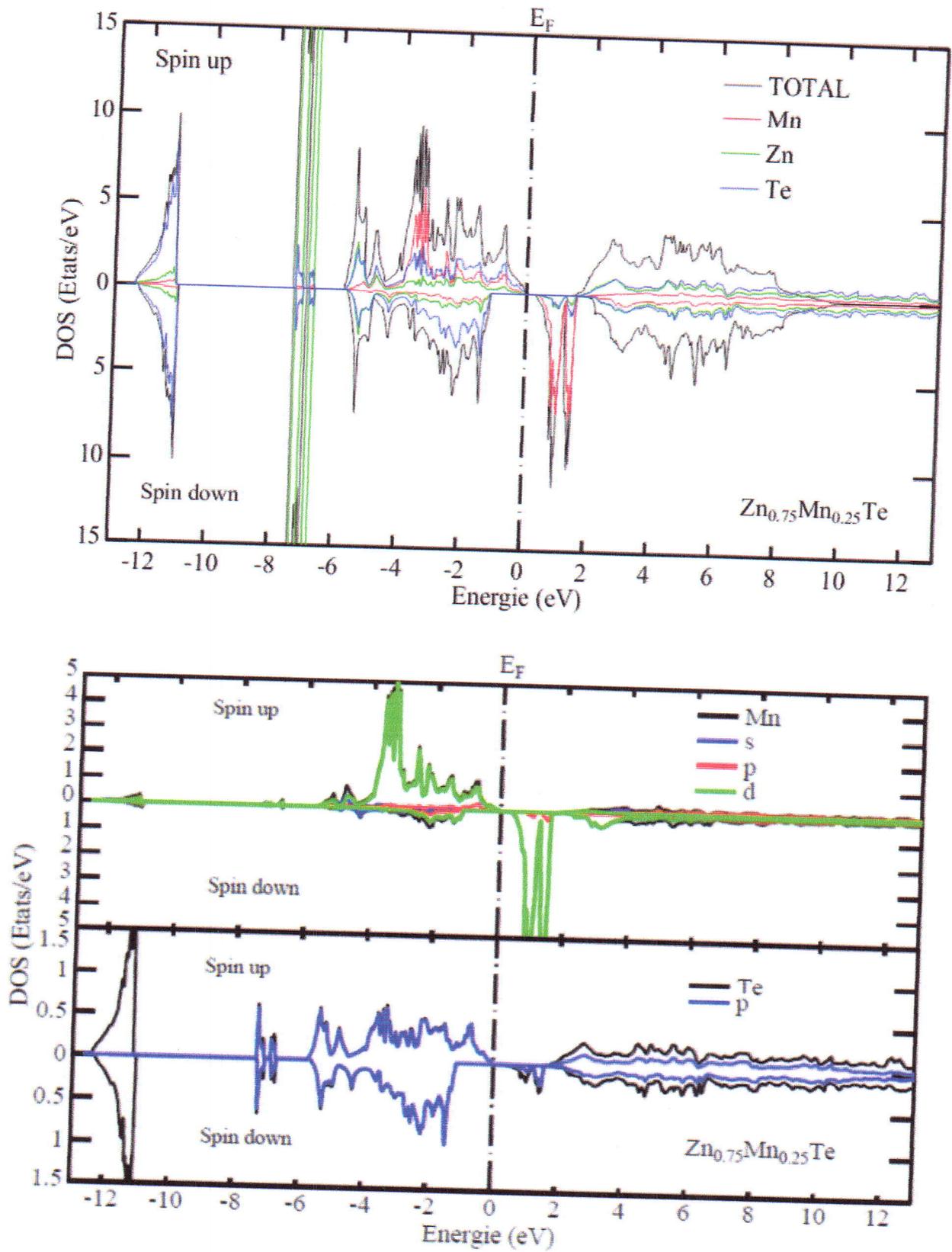


Figure III.9 : Densité d'états électroniques totales et partielles dépendant du spin du composé $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$.

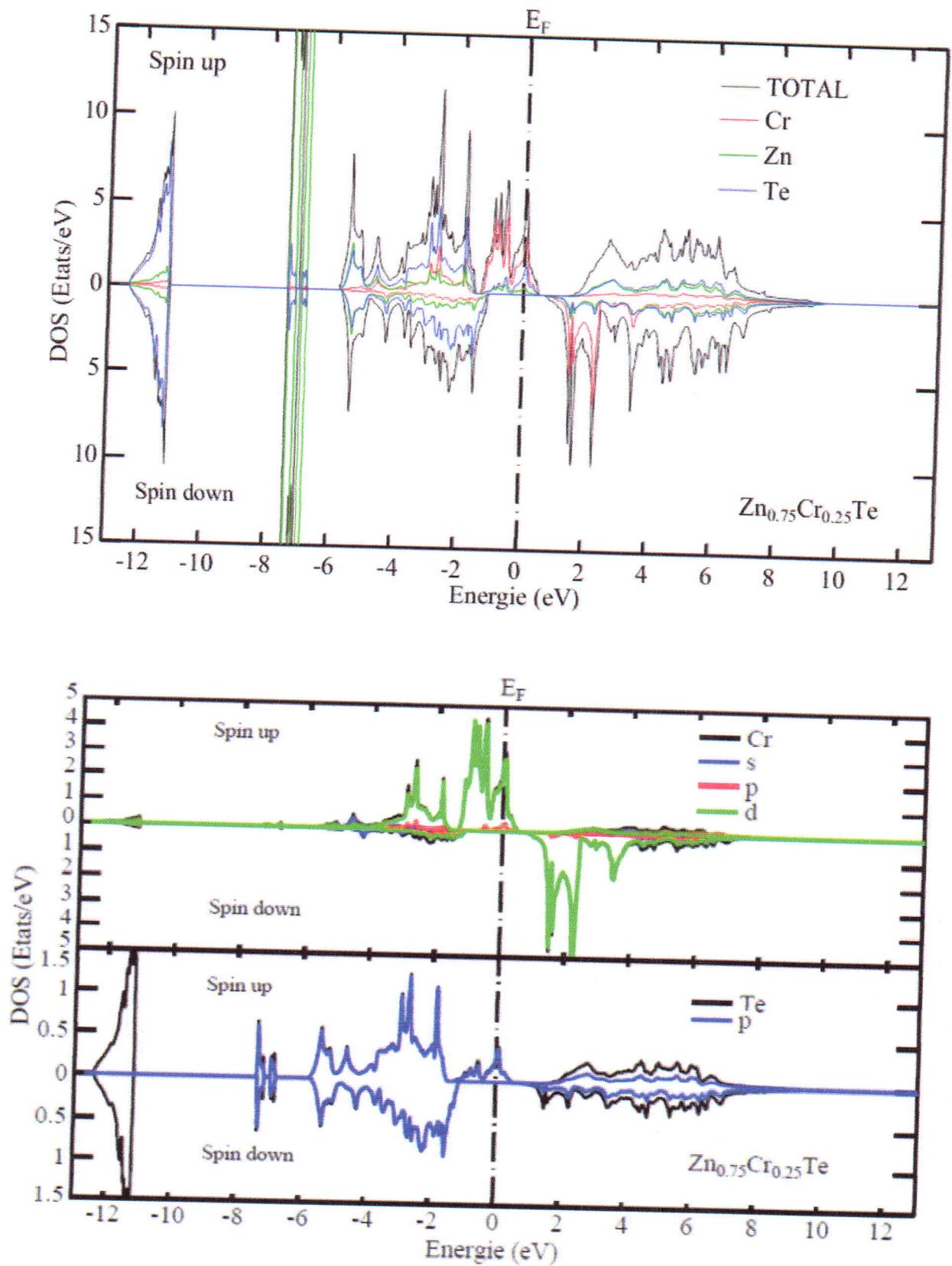


Figure III.10 : Densité d'états électroniques totales et partielles dépendant du spin du composé $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

III.3.4. Propriétés magnétiques

La meilleure façon d'étudier les propriétés magnétiques est de calculer la densité d'états électronique (DOS). Un moment magnétique apparaît lorsque la densité de spin up ou down est majoritaire par rapport à l'autre. Pour cela on a calculé d'abord les énergies totales des composés $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$.

Les moments magnétiques totaux et locaux calculés pour les semiconducteurs magnétiques dilués $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ sont présentés dans le tableau III.4.

Les résultats obtenus montrent que la supercellule de $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ possède un moment magnétique total de $5\mu_B$. Cette valeur est répartie au niveau des différents atomes et de la région interstitielle (III.4.). L'analyse de la distribution des densités de spin dans la supercellule indique que le moment magnétique est localisé principalement au niveau de l'atome de Mn avec une valeur $4.39\mu_B$, alors que les atomes de Zn et de Te possèdent respectivement les moments magnétiques suivants : $0.05103\mu_B$ et $0.04833\mu_B$. Le moment magnétique de la région interstitielle de la supercellule est de $0.51\mu_B$.

D'après les valeurs des différents moments magnétiques du composé $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ figurant dans le tableau III.4, nous remarquons que la valeur du moment magnétique calculée par atome d'impureté Cr est égal à $3.99\mu_B$, très proche de la valeur de $4\mu_B$ prévue pour le Cr^{+2} purement ionique. Une valeur entière de magnéton de Bohr du moment magnétique est un élément caractéristique de la demimétallicité ferromagnétique.

En outre, nous avons constaté la délocalisation de ces moments magnétiques autour de l'impureté Cr, ce qui induit des moments magnétiques sur les sites atomiques du semiconducteur hôte. nous avons constaté alors que la forte hybridation p-d entre les états d du Cr et des ions Te joue un rôle important dans la formation de moments magnétiques induits. Elle réduit le moment magnétique local de Cr à partir de sa valeur de charge d'espace libre de $4\mu_B$ et produit de petites moments magnétique local sur les sites de Zn et de Te. Les ions Cr provoquent des interactions ferromagnétiques entre les ions des éléments Zn et Te du semiconducteur hôte.

Tableau III.4 : Moment magnétique total et local des composés ZnMnTe et ZnCrTe.

Composé	Tot (μ_B)	Cr	Mn	Zn	Te	interstitiel
$Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$						
Notre travail (GGA) :	5.000	-	4.39	0.0510	0.0483	0.51
Autres résultats : GGA	4.996 ^a	-	3.965 ^a	0.138 ^a	0.096 ^a	0.771 ^a
$Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$						
Notre travail(GGA) :	3.99	3.8207	-	0.0409	-0.052	0.182
Autres résultats: GGA :	4.000 ^b	3.553 ^b	-	0.026 ^b	-0.035 ^b	0.509 ^b
GGA+U :	4.000 ^b	3.838 ^b	-	0.015 ^b	0.061 ^b	0.360 ^b

^a : Référence [14], ^b : Références [15]

III.3.5. Conclusion

Nous avons exploré les propriétés, électroniques et magnétiques des semiconducteurs magnétiques dilués $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ par l'utilisation d'un calcul de premier principes basé sur la méthode des orbitales muffin-tin linéarisées. Les courbes de la structure de bande d'énergie et de la densité d'état électronique de spin-dépendante montre clairement que le $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ est un semi-conducteur féromagnétique et que le semiconducteur magnétique dilué $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$ présente un caractère demi-métallique avec une polarisation en spin complète (100%) au niveau de Fermi.

L'hybridation p-d entre les états d du dopant et les états p de Te réduit le moment magnétique du dopant de sa valeur de charge d'espace libre et produit un moment magnétique local sur les sites non magnétiques de Zn et de Te.

Bibliographie

- [1] M. Methfessel, M. van Schilfgaarde, R. A. Casali, "in *Electronic Structure and Physical Properties of Solids, The use of LMTO Method*", edited by Hugues Dreysse, Springer Lecture Notes, Workshop Mont Saint Odille, France, 1988, (Springer Berlin, 2000), p. 114-147
- [2] V. Von Barth, L. Hedin, *J. Phys. C*, **5** (1972) 1629.
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett*, **77** (1996) 3865.
- [4] F.D Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci, USA*, **30** (1944) 244.
- [5] M.B. Kanoun, S. Goumri, A.E. Merad, J. Cibert, *J.Phys.D: appl.Phys.* **38**(2005) 1853.
- [6] M. Herbich, W. Mac, A. Twardowshi, k. Ando, Y. Shapira, M. Demianiuk, *Phys. Rev.* **B58**(1998) 1912.
- [7] R. Franco, P. Mori-Sanchez, J.M. Racio, R. Pandey, *Phys. Rev. B* **68** (2003) 195208.
- [8] O. Madelung(Ed.), *Numerical data and functional relationships in Science and Technology, Landolt Bornstein, New Series, Group III, Vol. 22*, Springer, Berlin, 1987(Pts.A).
- [9] L. Ley, A. Pollak, F.R. McFeely, S.P. Kowalczyk, D.A. Shyrley, *Phys. Rev. B* **9** (1974) 600.
- [10] A.E.Merad, M.B. Kanoun, G. Merad, J. Cibert, H. Aourag, *Mater. Chem. Phys.* **92**(2005) 333.
- [11] M. Lidner, G.F. Schütz, P. Link, H.P. Wagner, W. Kuhn, W. Gebhardt, *J. Phys. Condens. Matter* **4** (1992) 6401.
- [12] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, *Phys. Rev. B*, **13** (1976) 5188.
- [13] Furdyna, *J. Appl. Phys.* **64** (1988) R 29.
- [14] A.E. Merad, M.B. Kanoun, S. Goumri-Said . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **302** (2006) 536-542
- [15] S. Amari, S. Mécabih, B. Abbar, B. Bouhaf, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **302** (2006) 536-542.

Conclusion générale

La physique de la matière condensée et la science des matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne fera que progresser dans beaucoup de domaines. Certainement, l'évolution scientifique et technique dans le domaine de la découverte des nouveaux matériaux est nécessaire pour développer les domaines technologiques (électronique, spintronique, etc...). Avant d'employer les matériaux (solides) dans l'industrie, il faut s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques, mécaniques et optiques.

Ce travail a porté sur l'étude des propriétés structurales et électronique du tellure de zinc pur (ZnTe) ainsi que les structures électroniques et les propriétés magnétiques du semi-conducteurs magnétiques dilués (DMSs) $Zn_{0.75}Mn_{0.25}Te$ et $Zn_{0.75}Cr_{0.25}Te$, en utilisant un code ab-initio basé sur une méthode dite méthode d'orbitale Muffin-Tin linéaire (LMTO) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Dans un premier temps, nous avons déterminé les propriétés structurales du tellure de zinc dans sa phase cristalline zinc-blende en utilisant les deux approximations LDA et GGA. Les résultats obtenus sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales et les autres calculs théoriques.

Nous avons constaté que l'équation de Murnaghan donne de bons résultats en ce qui concerne les propriétés structurales (la constante du réseau, le module de compressibilité et sa dérivée) et que la LDA sous-estime les valeurs des paramètres de mailles alors qu'elle surestime celles du module de compression à l'inverse de la GGA qui surestime légèrement les deux paramètres.

Nous avons également étudié les propriétés électroniques de notre composé en déterminant

les structures de bandes et les densités d'états. Les résultats ont montré que le composé présente un gap direct au point de haute symétrie Γ . Les valeurs du gap trouvées sont sous estimés par rapport aux données expérimentales mais en bon accord avec la théorie. Ce qui est expliqué par une déficience connue de la DFT.

La deuxième étape de notre travail a été consacrée à l'étude des propriétés électroniques et magnétiques du ZnTe dopé manganèse et du ZnTe dopé chrome. Pour cela nous avons construit une supercellule de ZnTe contenant 8 atomes dans laquelle un atome de Zn a été substitué par un atome de Mn ou un atome de Cr (soit un dopage de 25 %).

Cette étude nous a révélé qu'à ce niveau de dopage, le système $\text{Zn}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ présente un caractère demi-métallique ce qui suggère une forte polarisation de spins.

Pour la supercellule du $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Te}$, nous avons déduit à travers les allures des densités d'états totales et partielles calculées que ce système est semi-conducteur ferromagnétique. Ces résultats restent en accord avec les autres résultats théoriques réalisés.

Les moments magnétiques totaux obtenus pour les deux dopants (Mn et Cr) étudiés sont proches de $5\mu_B$ et $4\mu_B$ respectivement. Ces valeurs sont réparties au niveau des différents atomes et la région interstitielle, et on a remarqué que le moment magnétique est localisé principalement au niveau des atomes de Mn et de Cr.

La forte hybridation p-d entre les états d du dopant et les états p de Te réduit le moment magnétique du dopant de sa valeur de charge d'espace libre et produit un moment magnétique local sur les sites non magnétiques de Zn et de Te.

Nous pouvons alors suggérer la fabrication de DMS à partir du tellure de zinc dopé avec du Mn et du Cr d'autant plus qu'il se présente comme candidat potentiel à l'injection de spins et pour l'élaboration de DMS ayant une température de curie supérieure à la température ambiante.

Les résultats obtenus nous encouragent à étudier le tellure de zinc dopé avec d'autres éléments et avec des concentrations plus petites.