



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABDELHAMID IBN BADIS-MOSTAGANEM
FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET DE L'INFORMATIQUE

Domaine des Sciences de la Matière

Département de PHYSIQUE

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour obtenir le Diplôme de Master en Physique

Option : Modélisation et caractérisation des matériaux

Présenté par

SAIDI Fatima

Intitulé :

**Effet des contraintes d'épitaxie sur des couches de
(Ga,Mn)As/(Ga,In)As**

Soutenu le : 31/05/2016

Devant le jury composé de :

Mr T. BELAROUSSI	M. C	Université de Mostaganem	Examineur
Mme Y. BENCHERIF	M.C	Université de Mostaganem	Examinatrice
Mr A. BOUKRA	M. C	Université de Mostaganem	Encadreur

INTRODUCTION GENERALE

La mise en évidence expérimentale en 1988 d'un transport électrique, dépendant du spin dans des multicouches ferromagnétiques Fe/Cr, marque véritablement le point de départ d'une nouvelle thématique, celle de l'électronique de spin (spintronique). Les deux effets majeurs, à savoir, la magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel (TMR) observée dans les jonctions tunnel métal/isolant/métal, sont exploités dans des mémoires de type MRAM (Magnetic Random Access Memories) utilisées pour l'enregistrement magnétique dans certains disques durs actuels [1]. En raison de la nature complexe de l'électronique de haute technologie, il est souhaitable de rechercher des composés ayant des propriétés physiques variables. Afin de remédier à cela, les composés binaires, de propriétés optoélectroniques connues, peuvent être modifiés par différentes méthodes, par exemple, en créant des imperfections ou en formant des alliages de composés binaires.

Un semi-conducteur III-V dopé avec des éléments du groupe IIIA est appelé alliage III-V. De même, un semi-conducteur magnétique dilué (DMS, pour Dilute Magnetic Semiconductor) est formé lorsque le semi-conducteur III-V est dopé avec un élément de transition 3d. Les composés DMS ont attiré l'attention pour leur possible utilisation en spintronique. L'élaboration de nouvelles structures semiconductrices magnétiques diluées III-Mn-V vers la fin des années 1980, a été à l'origine d'un important regain d'intérêt pour les matériaux DMS. En effet, une phase ferromagnétique homogène apparaît pour de faibles pourcentages de manganèse (~ 1%) [2]. De nombreuses études expérimentales ont permis de distinguer le $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ parmi la famille des semiconducteurs magnétiques III-Mn-V. Cela a été possible grâce à ses propriétés électriques et magnétiques intéressantes en rapport avec le haut pourcentage de manganèse introduit ($x > 5\%$), une haute température de Curie de 190K et une polarisation en spin atteignant les 85 % [3,4].

En raison du temps, de l'argent et des complications impliquées dans la croissance et la caractérisation des différents échantillons solides, il est impératif d'utiliser des techniques de calcul pour prédire les propriétés importantes des matériaux pour leurs possibles applications. La théorie de la fonctionnelle de la densité reste à l'heure actuelle l'outil essentiel pour l'étude de nombreuses propriétés physiques des métaux, semi-métaux, semi-conducteurs, des demi-métaux, des supraconducteurs et isolants.

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'effet de la contrainte sur le matériau GaMnAs dopé avec une concentration de 6,25% de Mn.

Dans le chapitre I de ce mémoire, nous présentons des généralités sur les matériaux magnétiques, les moments magnétiques et la notion de magnétisation et d'anisotropie magnétique. On terminera ce chapitre par la notion de contrainte biaxiale et l'effet dû au désaccord de mailles

Dans le chapitre II, après un bref aperçu sur la méthode de calcul basée sur la DFT, on débutera le travail par une étude structurale des composés binaire et ternaire. L'effet d'une tension ou d'une compression sur le matériau GaMnAs en modifiant le pourcentage d'indium du substrat utilisé sera aussi étudié. On terminera ce travail par une conclusion générale.

CHAPITRE I

Matériaux magnétiques et contrainte biaxiale

I.1 Matériaux Magnétiques :

La présence d'un moment magnétique permanent dans un atome isolé le rend magnétique ce moment est représenté par un vecteur d'aimantation de module constant. Dans l'absence d'interaction magnétique entre les atomes magnétiques dans un cristal, les moments magnétiques seraient désordonnés à toute température (ordres paramagnétique). Le cristal sera magnétiquement ordonné s'il y avait des interactions magnétiques en dessous d'une température critique T_c bien précise, microscopiquement on remarque une aimantation spontanée non nulle dans le cristal, état ferromagnétique (ou ferrimagnétique). La somme de tous ces moments magnétiques nous donne une aimantation globale nulle dans le cas ordonné, c'est le caractère antiferromagnétique pour l'échelle microscopique.

Pour obtenir l'ordre ferromagnétique on fait la somme des moments magnétiques qui ont la même amplitude et la même direction, si l'un des moments a une orientation différente de celle de l'aimantation spontanée l'ordre est ferrimagnétique [5,6].

I.1.1 Moment Magnétique :

Le magnétisme vient du moment magnétique intrinsèque de l'électron (le moment magnétique de spin) et le mouvement des électrons autour du noyau atomique (le moment magnétique orbital), figure I.1. Selon la mécanique quantique le spin de l'électron a deux projections possibles qui sont représentés par un 'état haut' ou 'état bas'. Tous les états électroniques non remplis sont magnétiques dans les atomes libres et chaque électron non apparié contribue avec magnéton de bohr (μ_B) au spin total du moment magnétique. Dans le cas des atomes isolés, le moment magnétique total fait inclure le moment orbital angulaire des électrons au moment magnétique total [6,7].

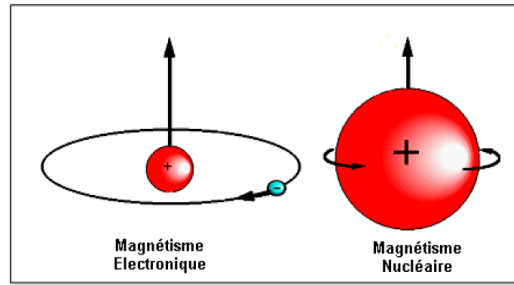


Figure I.1 : Origine du magnétisme dans la matière. [6]

I.1.1.1 Moment magnétique de spin :

L'électron tourne aussi sur lui-même (spin) et présente donc un moment magnétique dit moment de spin μ_s . Ce dernier est une propriété purement quantique des électrons et n'est autre que le magnéton de Bohr. Le moment magnétique de spin est donné par : [7,8].

$$\vec{\mu}_s = -g \frac{e}{2m} \vec{S}$$

Où g est le facteur de Landé de valeur proche de 2 et \vec{S} le moment angulaire de spin.

$$\text{Avec } \vec{S} = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

Suivant z : $S_z = m_s\hbar$ où $m_s = \mp \frac{1}{2}$ le nombre quantique de spin magnétique.

Le moment magnétique de spin devient :

$$\mu_s = -\frac{e}{m_e} m_s \hbar$$

I.1.1.2 Moment magnétique orbital :

Considérons un électron, de charge $q = -e$ et de masse m décrivant une orbite circulaire de rayon r à la vitesse v [7,8], figure I.2.

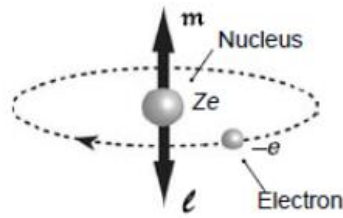


Figure I.2 : Atome de Bohr, l'électron décrit une orbite circulaire ou le moment angulaire l et le moment magnétique \vec{m} ont des directions opposées [7].

Le moment angulaire de cet électron est donné par :

$$\vec{l} = \vec{r} \wedge m_e \vec{v} = m_e r^2 \vec{n}$$

Où \vec{n} est la normal au plan contenant l'orbital et v la vitesse de rotation de l'électron autour du noyau.

Nous savons qu'à cette boucle de courant est associé un moment dipolaire magnétique.

$$\vec{m} = IS\vec{n}$$

Avec $S = \pi r^2$ et I l'intensité du courant donnée par :

$$I = \frac{dq}{dt} = -\frac{e}{T} = -\frac{ew}{2\pi}$$

la période $T = 2\pi/w$.

Le moment magnétique orbital sera donné par :

$$\vec{m} = -\frac{e}{2} w r^2 \vec{n}$$

Ainsi on peut trouver une relation entre \vec{m} et \vec{l} , $\vec{m} = \gamma \vec{l}$

Une relation valable même pour les atomes poly-électroniques. Où $\gamma = e/(2m_e)$ est appelé le rapport gyromagnétique.

L'énergie de l'électron est quantifiée (discrète) elle correspond à la différence des énergies entre les deux niveaux du passage d'électron. Pour tenir compte de ce fait Bohr a émet une hypothèse selon laquelle le moment cinétique est proportionnel à \hbar

$$l = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}$$

Où h la constante de Planck.

$$m = \gamma l \Rightarrow m = -\frac{e}{2m_e} n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow m = -n \frac{eh}{4\pi m_e} \Rightarrow m = -n\mu_B$$

Le moment μ_B est appelé le moment orbital. Ce moment est quantifié : il doit être un multiple du magnéton de Bohr défini par : $\mu_B=9.273.10^{-24}$ A.m².

I.1.2 Magnétisation et anisotropie magnétique :

I.1.2.1 Magnétisation :

L'alignement régulier des moments magnétiques des atomes donne la magnétisation, elle est définie par le moment magnétique par unité de volume. En l'absence d'un champ magnétique appliqué sur un matériau, les moments magnétiques voient perdre leur orientation et auront des directions aléatoires, mais en présence d'un champ magnétique ils vont s'aligner progressivement suivant la direction du champ. Cependant, il y a certains éléments qui présentent des moments magnétiques spontanés ou une apparition de moments magnétiques alignés en absence d'un champ appliqué [9].

I.1.2.2 Anisotropie magnétique :

L'anisotropie magnétique d'un matériau traduit le fait que son énergie libre dépend de la forme du matériau et de l'orientation de son aimantation par rapport à ses axes cristallographiques. L'orientation pour laquelle cette énergie libre est minimale (maximale) correspond à un axe de facile (difficile) aimantation. Il est nécessaire de connaître l'anisotropie magnétique pour le bon fonctionnement d'un dispositif [9].

I.2 Réseau cubique sous contrainte biaxiale :

I.2.1 Tenseur de déformation :

Sous l'action de forces extérieures, les corps solides se déforment. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet pour laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Les éléments du tenseur des déformations ε_{ij} sont définis d'une façon générale par la relation suivante [10] :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1)$$

Avec e_{ij} et e_{ji} les composantes de déformations, ε_{ij} s'écrit :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (e_{ij} + e_{ji})$$

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (2)$$

I.2.2 Tenseur de contraintes :

La contrainte est par définition, la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide. Le tenseur des contraintes, noté σ , est également représenté par une matrice 3×3 symétrique, comme le tenseur des déformations [10].

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (3)$$

L'indice (i) indique la direction de la force et l'indice (j) indique la normale à la facette sur laquelle s'applique la force. (Voir figure I.3)

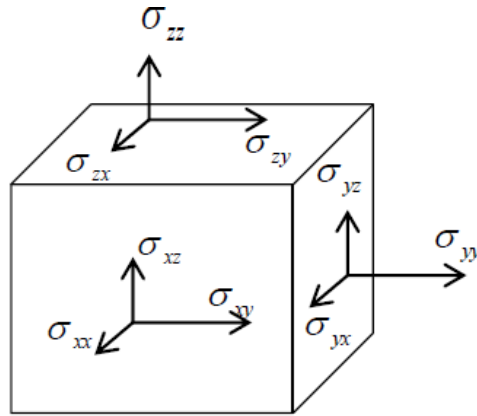


Figure I.3 : Composantes du tenseur des contraintes. [11]

I.2.3 Loi de Hooke :

Quand on applique une contrainte à un corps solide il se déforme. Cette déformation est réversible et est proportionnelle en grandeur a la contrainte appliquée [12].

La loi de Hooke dans le cas général s'écrit :

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k,l} S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (4)$$

Elle fait relier les composantes du tenseur de déformation ε_{ij} à celles du tenseur de contrainte σ_{kl} .

Le tenseur des contraintes devient alors :

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \sigma_j = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} = \sigma_1 \\ \sigma_{yy} = \sigma_2 \\ \sigma_{zz} = \sigma_3 \\ \sigma_{yz} = \sigma_4 \\ \sigma_{xz} = \sigma_5 \\ \sigma_{xy} = \sigma_6 \end{bmatrix}; \quad j = 1,2,3, \dots, 6 \quad (5)$$

Le tenseur des déformations devient alors :

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \varepsilon_i = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} = e_1 \\ \varepsilon_{yy} = e_2 \\ \varepsilon_{zz} = e_3 \\ 2\varepsilon_{yz} = e_4 \\ 2\varepsilon_{xz} = e_5 \\ 2\varepsilon_{xy} = e_6 \end{bmatrix}; \quad i = 1,2, \dots, 6 \quad (6)$$

La loi de Hooke s'exprime alors :

$$\varepsilon_i = \sum_{j=1}^6 S_{ij} \sigma_j \quad (7)$$

Les constantes S_{ij} sont appelées constantes d'élasticité, et inversement, chaque composante des contraintes est liée linéairement à toutes les composantes du tenseur de déformation par la relation :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (8)$$

La loi de Hooke s'écrit :

$$\sigma_j = \sum_{i=1}^6 C_{ij} \varepsilon_i \quad (9)$$

Dans le cas générale:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \end{bmatrix}$$

Cette loi appliquée au cas d'un cristal cubique donne [12]:

$$C_{11}=C_{22}=C_{33}, \text{ et } C_{12}=C_{21}=C_{13}=C_{31}=C_{23}=C_{32}, \text{ et } C_{44}=C_{55}=C_{66}$$

La matrice [C] s'écrit dans ce cas :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \end{bmatrix} \quad (10)$$

La matrice des compliances élastiques [S] qui a la même forme que [C], elle s'écrit de la forme :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (11)$$

Les équations explicites pour les composantes S_{ij} en fonctions des termes C_{ij} sont données par :

$$S_{11} = (C_{11} + C_{12}) / [(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})] \quad (12)$$

$$S_{12} = \frac{(-C_{12})}{[(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})]} \quad (13)$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \quad (14)$$

Le tenseur d'une contrainte biaxiale s'écrit :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Dans un système d'axe (x,y,z) , une contrainte biaxiale qui s'exerce dans le plan (001) s'écrit :

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} X & 0 & 0 \\ 0 & X & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

Où X est la contrainte.

A partir des relations (11) et (16) nous obtenons :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ X \\ 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

D'où

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = (S_{11} + S_{12})X \quad (18)$$

$$\varepsilon_{zz} = 2S_{12}X \quad (19)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \quad (20)$$

Sous l'action d'une contrainte biaxiale, le cristal initialement cubique devient quadratique (voir figure I.4a,b) et nous avons :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_{\parallel} - a}{a} \quad (21)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{a_{\perp} - a}{a} \quad (22)$$

Où a , a_{\parallel} et a_{\perp} , sont respectivement le paramètre de la maille non contrainte, de la maille perpendiculaire à la surface (100) et parallèle à celle-ci.

De (19) nous obtenons :

$$X = \frac{1}{S_{11} + S_{12}} \varepsilon_{xx} \quad (23)$$

$$\text{D'où : } \varepsilon_{zz} = \frac{2S_{12}}{S_{11} + S_{12}} X \quad (24)$$

Ce qui donne :

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (25)$$

I.2.4 Effet du désaccord de maille sur les structures à semiconducteurs :

Quand on fait croître une couche solide de paramètre de maille différent de celui du substrat d'épitaxie, une contrainte biaxiale se crée dans le plan de croissance et déforme les couches d'une manière tétragonale perpendiculairement à ce plan.

La figure I.4a représente le cas où le matériau A est comprimé dans le plan de croissance (x,y) et étiré suivant la normale à ce plan ($a_A > a_B$). Il existe deux cas :

- a. Si l'épaisseur de la couche $h \ll h_c$; celle-ci est soumise à une compression biaxiale et les couches doivent être suffisamment fines pour supposer la déformation constante le long de la direction de croissance.
- b. Si l'épaisseur de la couche $h \gg h_c$; les dislocations migrent à travers l'interface ; il y a alors relaxation de la contrainte.

Dans le cas de la figure I.4b où ($a_A < a_B$), le matériau A est détendu dans le plan de croissance et comprimé suivant la normale à ce plan. [13].

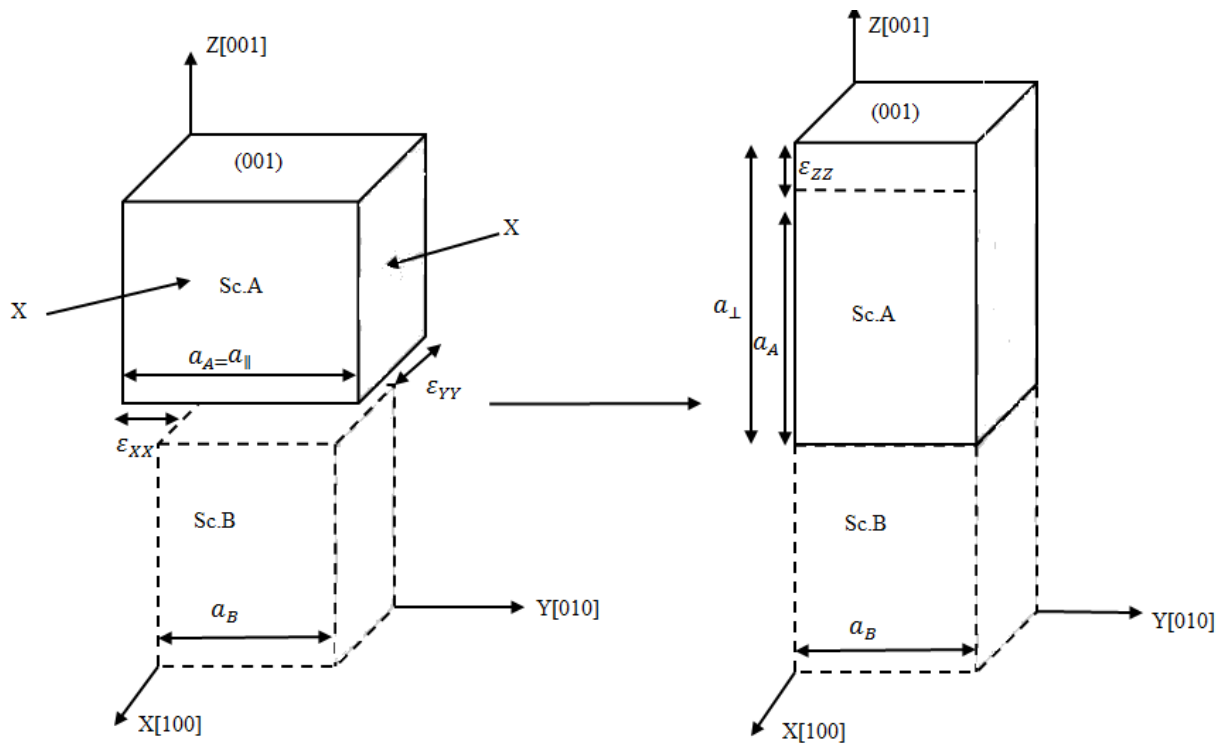


Figure I.4 a : Maille sous contrainte biaxiale: cas d'une compression.
ScA, B (Semi-conducteur A, B).

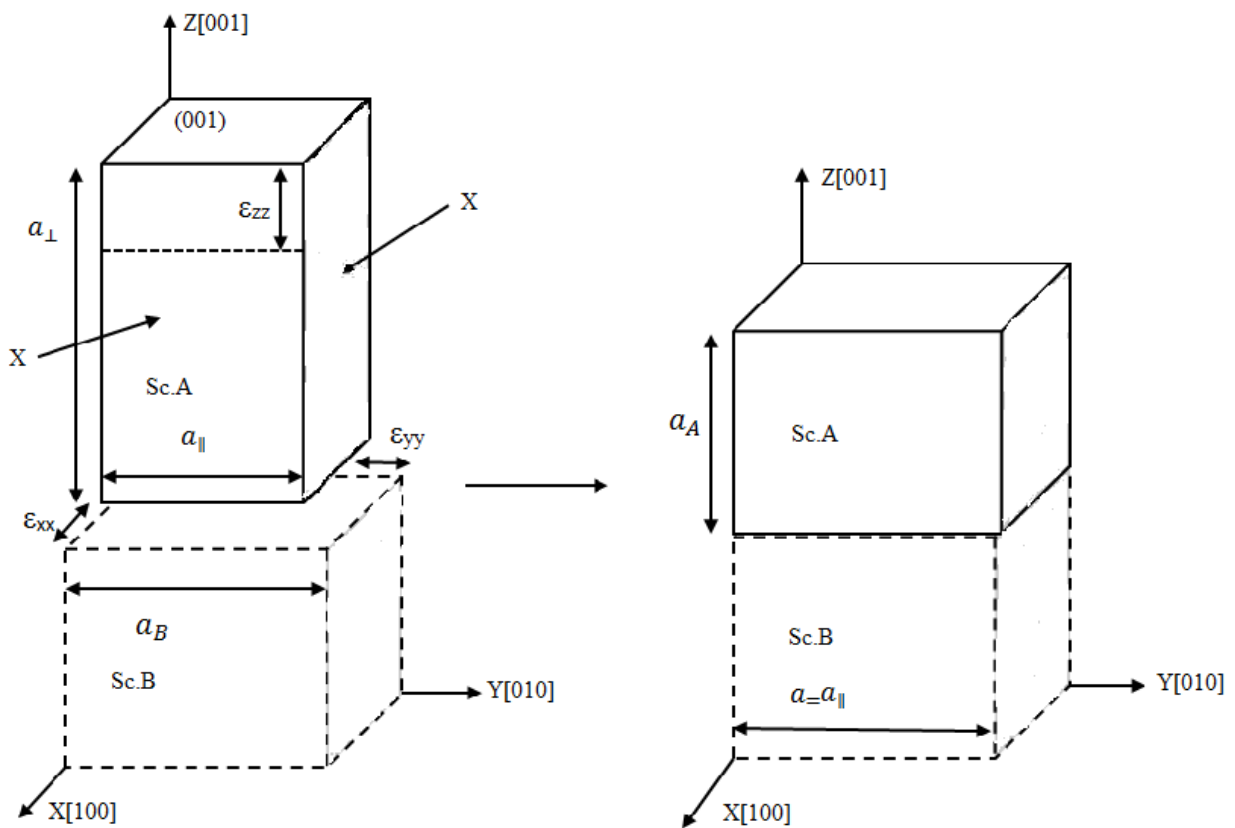


Figure I.4b : Maille sous contrainte biaxiale: cas d'une tension.

I.2.5 Effet de la contrainte biaxiale sur la structure de bandes :

L'effet de la contrainte se traduit par un déplacement des extrema des bandes électroniques induisant une levée de dégénérescence de la bande de valence Γ_8 .

En l'absence de la contrainte, les semi-conducteurs de type zinc blende présentent une bande de valence six fois dégénérée [13].

Sous l'effet d'une compression biaxiale, nous assistons à une ouverture du gap accompagnée d'une levée de dégénérescence des bandes de valence correspondant, ainsi la bande des trous lourds est placée au dessus de celle des trous légers. Dans le cas d'une tension biaxiale, l'énergie de la bande interdite est réduite par le biais de la composante hydrostatique. La levée de dégénérescence déplace la bande de valence vers les hautes énergies, dans le plan de la couche (x, y). [14]

Les bandes de trous lourds sont décalées en énergie de la quantité $-bQ_\varepsilon$ et les bandes de trous légers sont décalées de la quantité bQ_ε (voir figure I.5) où b est l'énergie potentielle de déformation, qui vaut -1,7 eV pour le GaAs, et Q_ε est défini par :

$$Q_\varepsilon = \varepsilon_{zz} - \frac{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{2}$$

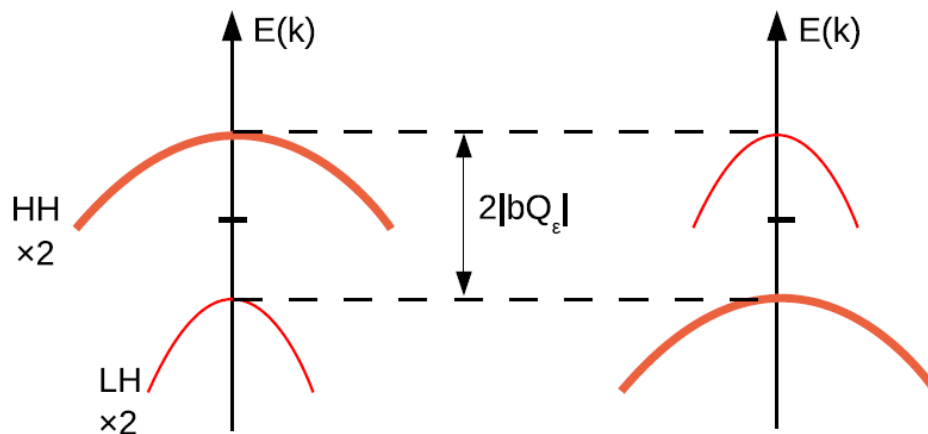


Figure I.5: Effet des contraintes sur les bandes de trous lourds et de trous légers de GaAs.

CHAPITRE II

Effet des contraintes d'épitaxie sur les couches de (Ga,Mn)As

II. Effet des contraintes d'épitaxie sur les couches de (Ga,Mn)As

II.1 Introduction :

Les films (Ga,Mn)As ne peuvent être déposés que sur des substrats bien appropriés, tels que le GaAs ou le (Ga,In)As. Des mesures de diffraction des rayons X ont montré que les constantes de réseau hors plan de films de (Ga,Mn)As dépendent sensiblement des constantes de réseau du substrat sous-jacent, cela suite au désaccord de maille entre le (Ga,Mn)As et le substrat. De même, la constante de réseau dans le plan est liée à celle du substrat, et le film est soit sous tension ou sous contrainte de compression. Dans ce travail, par un calcul ab-initio, on s'intéressera à l'effet de la concentration d'Indium sur la couche (Ga,Mn)As. On prévoit un renversement de l'aimantation avec la contrainte. On montrera en particulier que l'aimantation est perpendiculaire (hors plan) et change avec la concentration d'indium pour des couches de (Ga,Mn)As/(Ga,In)As. Par contre elle reste confinée dans le plan pour les couches en compression de (Ga,Mn)As/GaAs.

II.2 Code utilisé et détails de calcul:

Le code utilisé pour les calculs est le logiciel Wien2k. Ce code émane de travaux de l'Institut viennois de chimie des matériaux, travaux coordonnés depuis près de 25 ans par Karlheinz Schwarz et Peter Blaha [15]. Il utilise un potentiel complet linéarisé et des ondes planes augmentées (FP-LAPW) comme ensemble de base pour résoudre les équations de Kohn-Sham. Cette méthode est dite tout-électron, car tous les électrons sont considérés dans les calculs, ainsi il n'y a pas d'approximation sur le potentiel autour des noyaux. Dans cette technique, la maille élémentaire est divisée en deux régions, une région au voisinage du noyau atomique ou sphères atomiques dites sphères Muffin Tin (R_{MT}) qui sont centrées autour des noyaux dans les quelles le potentiel et les fonctions d'ondes sont décrites par des fonctions atomiques sphériques. La deuxième région est la région interstitielle entre les atomes, elle est décrite par des

ondes planes. Le calcul est basé sur l'énergie de coupure (cut-off) qui sépare les états du cœur de ceux de valence et le produit sans dimension $R_{\text{MT}}K_{\text{max}}$, qui représente l'énergie de coupure des ondes planes de la zone interstitielle, où K_{max} représente la valeur maximale du vecteur d'onde de la base utilisée dans la description de l'ensemble du système des électrons présents dans l'espace entre les sphères atomiques.

Le package Wien2k est écrit en FORTRAN90 et fonctionne sous un système d'exploitation LINUX. Il est constitué de plusieurs programmes indépendants basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le terme d'échange-corrélation figure dans le code Wien sous la version LDA de Perdew et Wang [16] et GGA de Perdew, Burke et Ernzerhof [17].

Plusieurs propriétés des matériaux peuvent être calculées par le biais du logiciel Wien2k, parmi les quelles on peut citer :

- Les bandes d'énergie, la densité d'états.
- Densités d'électrons, densités de spin, et facteurs de structure des rayons X.
- L'énergie totale, les forces atomiques, les géométries d'équilibre, les optimisations de structure, dynamique moléculaire.
- Calcul des Phonons.
- Gradients de champ électrique, les déplacements isomériques.
- Polarisation des spins (structures ferro ou antiferromagnétiques), le couplage spin-orbite.
- Les spectres d'émission et d'absorption des rayons X.
- Les propriétés optiques.
- Surfaces de Fermi.

Nous avons utilisé la méthode ab initio dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code Wien2k où le terme d'échange et corrélation est de type GGA pour le calcul des paramètres d'équilibre. Pour résoudre l'équation d'état dans les différentes phases structurales des matériaux étudiés, nous avons utilisé des rayons RMT constants et propres à chaque type d'atome. La valeur

du rayon a été fixée à 2.0, 2.3, 2.1 et 2.0 u.a. pour les atomes Ga, In, As et Mn. L'énergie de coupure des ondes planes de la zone interstitielle est choisie de sorte que $R_{MT}K_{Max}=7$. Dans le cas du calcul des paramètres d'équilibre, l'échantillonnage de la zone de Brillouin a été effectué avec un nombre total de 2000 points k pour les matériaux binaires, 600 points k pour le matériau ternaire à forte concentration et 50 points k pour de faibles concentrations.. L'énergie de coupure (cut-off) a été prise égale à -6 Ry, la précision de calcul sur l'énergie étant de 10^{-4} Ry.

II.2.1 Procédure d'autocohérence du calcul du potentiel

Le calcul d'un potentiel autocohérent, ou d'une densité électronique autocohérente, consiste en fait à résoudre les équations de Kohn et Sham de façon autocohérente.

La procédure habituelle est décrite sur le schéma de la figure II.1. Le point de départ du calcul est une structure cristalline, ou plus généralement des positions atomiques dans une cellule donnée.

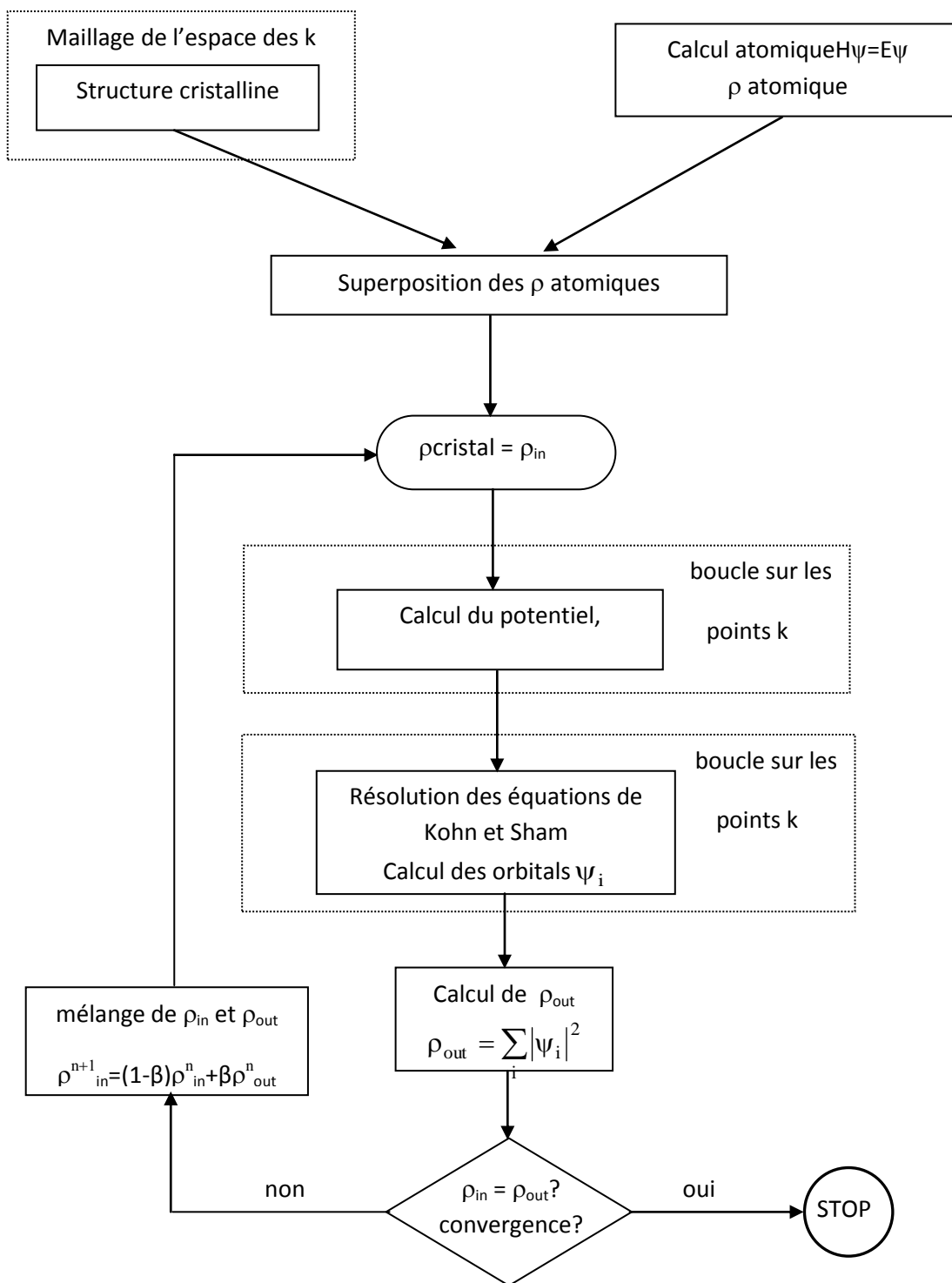


Figure II.1 : Schéma général de la procédure d'autocoherence du calcul de la densité de charge de l'état fondamental du système.

II.3. Propriétés structurales :

Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, a_0 étant le paramètre de maille.

Dans la structure zinc blende (voir la figure II.2), les ions S^{2-} occupent les nœuds d'un réseau cubique à faces centrées et les ions Zn^{2+} occupent la moitié des sites tétraédriques sur deux dans ce réseau c'est à dire les centres de la moitié des 8 petits cubes d'arête $a/2$ délimités par 4 anions S^{2-} les plus proches.

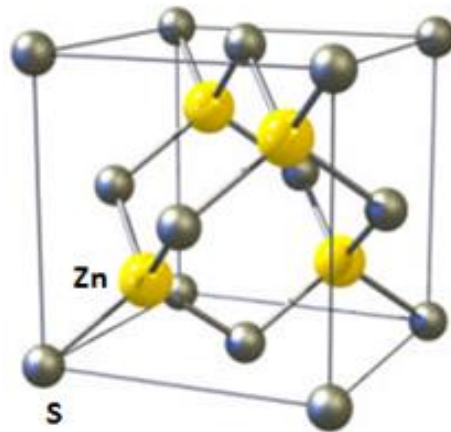


Figure II.2: Structure zinc-blende

Nous avons débuté notre étude par l'optimisation des composés binaires GaAs et InAs dans la structures zinc blende, dans le but de déterminer leurs propriétés structurales (pas du réseau, module de rigidité ainsi que sa dérivée première). L'étude est étendue au calcul des paramètres structuraux des composés GaAs dopés au manganèse (Mn) et à l'indium (In).

Pour calculer les paramètres de réseau à l'équilibre on a utilisé l'équation de Murnaghan [18] donnée par :

$$E(V) = E_0 - \frac{(E_0 V_0)}{B'_0 - 1} + \frac{B_0 V}{B'_0} + \left(\frac{(V_0/V)^{B_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right)$$

V_0 : le volume d'équilibre à l'état fondamental.

B_0 : module de rigidité et B'_0 sa dérivée première.

Avec :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'_0 P}{B_0} \right)^{-\frac{1}{B_0}}$$

Le module de rigidité B_0 est déterminé par :

$$B_0 = V \frac{\partial^2 E}{\partial^2 V}$$

II.3.1. Composées binaires :

L'optimisation des énergies totales en fonction du volume $E(V)$ des composés binaires GaAs et InAs dans la structure zinc blende sont représentées sur la figure II.3.

Les valeurs des paramètres structuraux à l'équilibre pour le GaAs et InAs sont regroupés dans le tableau II.1. Les résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

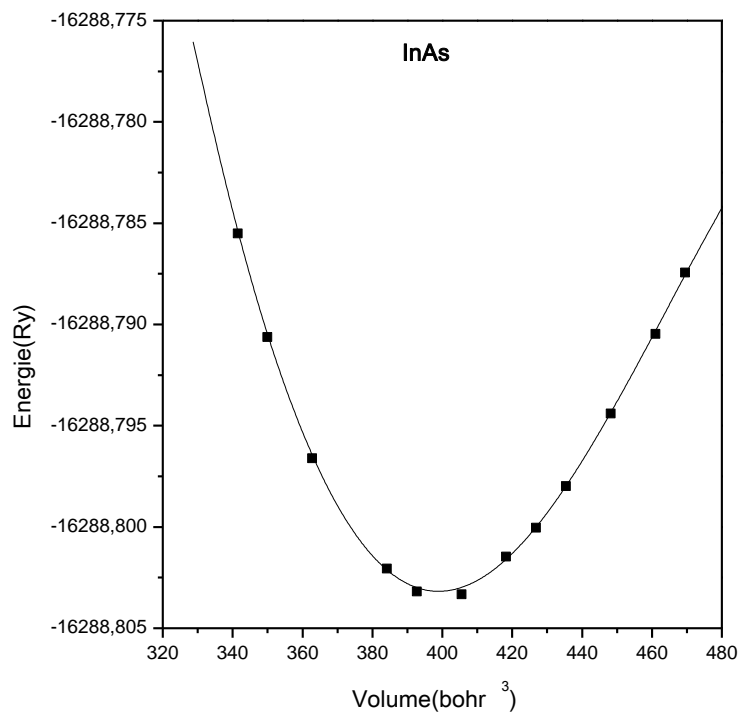
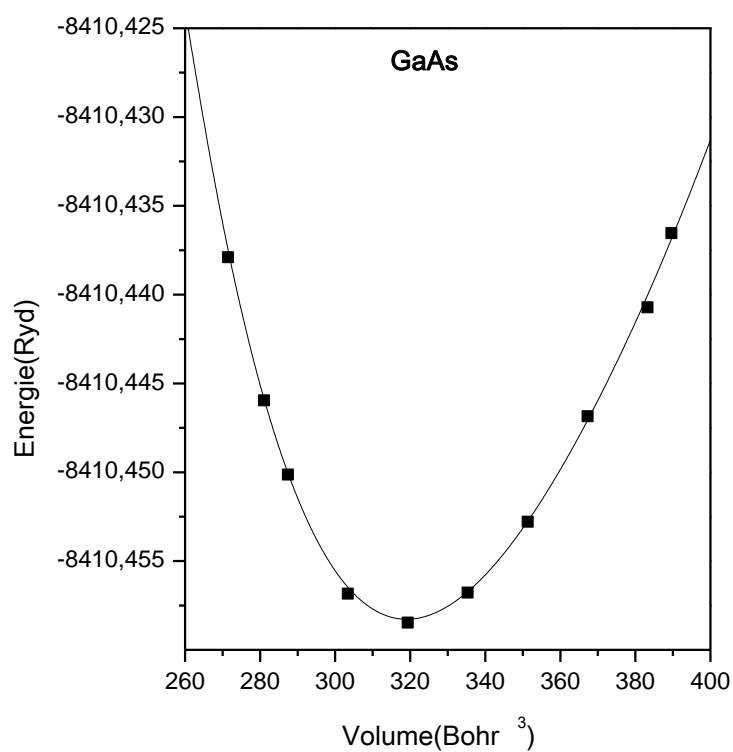


Figure II.3 : Energie totale des composés binaires GaAs et InAs en fonction du volume.

Matériau		$a_{\text{éq}}(\text{Bohr})$	$B_0(\text{GPa})$	B_0'
GaAs	Notre calcul	10.8479	59.9285	5.2061
	Autre calcul	10.8469 ^[19]	59.96 ^[19]	4.41 ^[19]
	Expérimental	10.6825 ^[20]	56.5 ^[20]	
InAs	Notre calcul	11.6807	48.5390	4.2789
	Autre calcul	11.5084 ^[21]		
	Expérimental	11.4517 ^[21]		

Tableau II.1 : Paramètres structuraux des matériaux GaAs et InAs.

II.3.2. Composés ternaires :

Pour modéliser l'alliage dans la phase zinc blende nous avons utilisé une super cellule de 32, 16 et 8 atomes, qui correspondent à 2x2x1, 2x1x1 et 1x1x1 de la cellule cubique conventionnelle. Il est donc possible de former un solide dit ternaire ou quaternaire en mélangeant deux ou trois semi-conducteurs III-V.

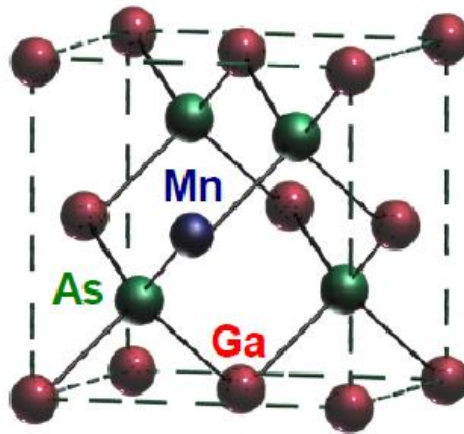


Figure II.4 : Structure cristalline de GaMnAs.

On considère le matériau GaMnAs, la variation de l'énergie en fonction du volume de ce composé pour une concentration de 6.25 % ($G_{0.9375}Mn_{0.0625}As$) pour les deux états magnétique et non magnétique est représentée sur la figure II.5. On remarque que la phase de plus basse énergie est la phase magnétique pour ce matériau.

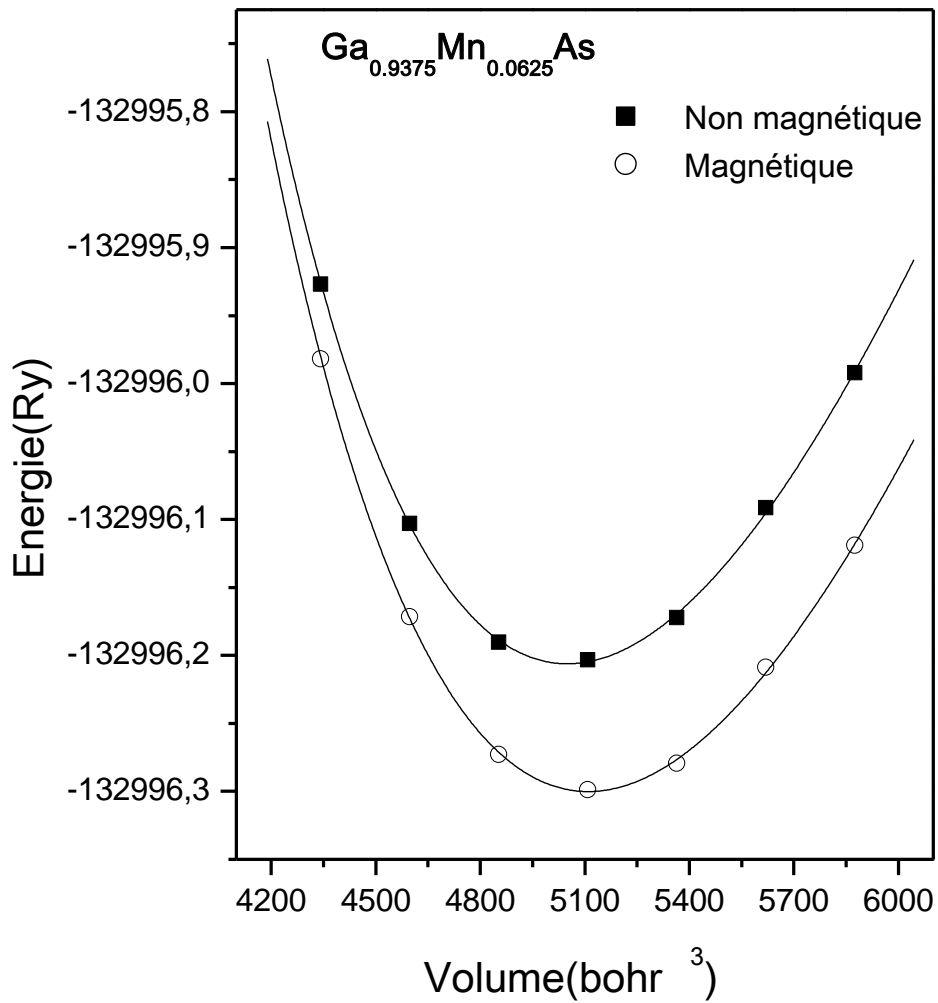


Figure II.5: Energie total de Ga_{0,9375}Mn_{0,0625}As en fonction de volume.

Les variations de l'énergie en fonction du volume du composé ternaire Ga_{1-x}In_xAs avec différentes concentrations d'indium (3.125, 6.25, 12.5, 25, 50, et 75%) sont représentées par les figures (II.6.a et b). Une pour de faibles concentrations et l'autre pour des concentrations élevées.

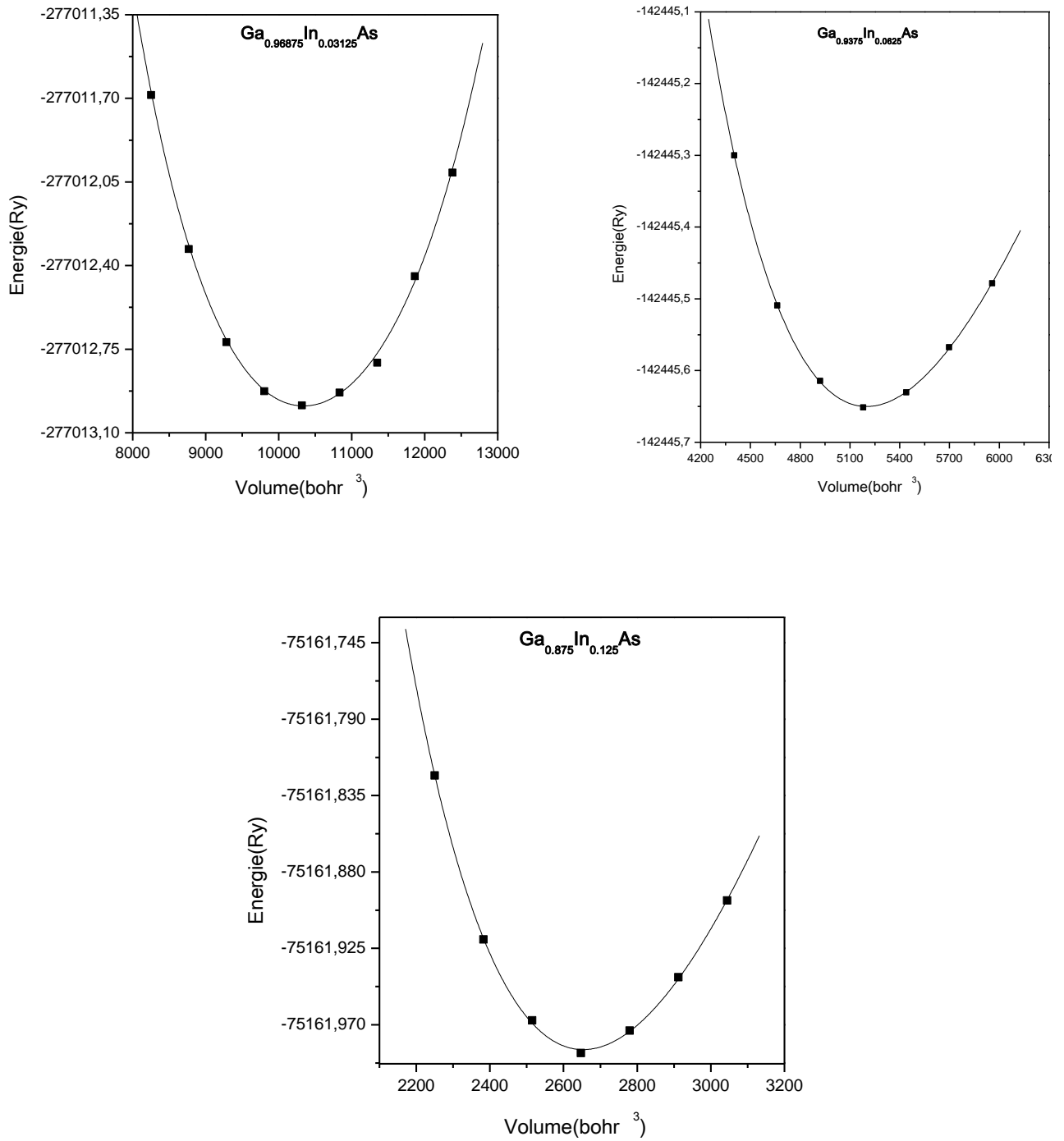


Figure II.6.a : Energie total du Ga_{1-x}In_xAs en fonction du volume pour de faibles concentrations.

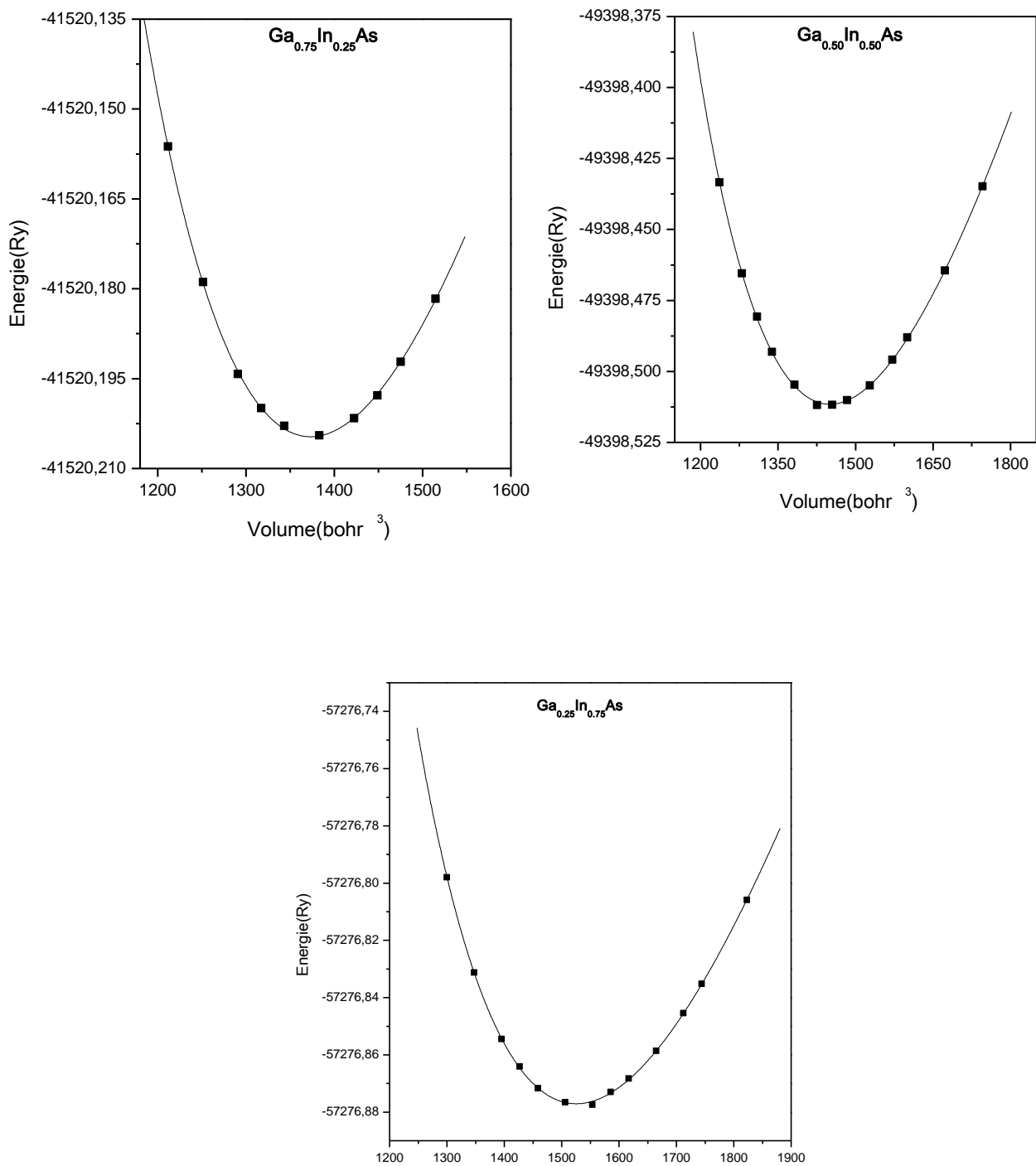


Figure II.6.b : Energie total du Ga_{1-x}In_xAs en fonction de volume pour des concentrations élevées.

Les valeurs des paramètres structuraux à l'équilibre pour le $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{As}$ et le $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ sont regroupées dans le tableau II.2.

Matériau	Concentration (%)	$a_{\text{éq}}$ (Bohr)	B_0 (GPa)	B_0'
$\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$	6,25	10.8503	59.9070	4.4826
$\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$	3.125	10.8884	80.4183	0.9478
	6.25	10.9143	59.6945	4.9358
	12.5	10.9882	57.2112	4.3534
	25	11.1151	56.7304	5.4648
	50	11.3200	53.0183	4.7833
	75	11.5114	50.5174	4.8746

Tableau II.2 : Paramètres structuraux des matériaux $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ et $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$.

La figure II.7 représente le paramètre de maille en fonction de la composition d'indium. On note une faible déviation positive par rapport à la loi de Végard. Dans les composés conventionnels III-V cette déviation est généralement faible est positive. L'origine physique de cette faible déviation provient essentiellement du faible désaccord de maille entre les éléments parents GaAs et InAs.

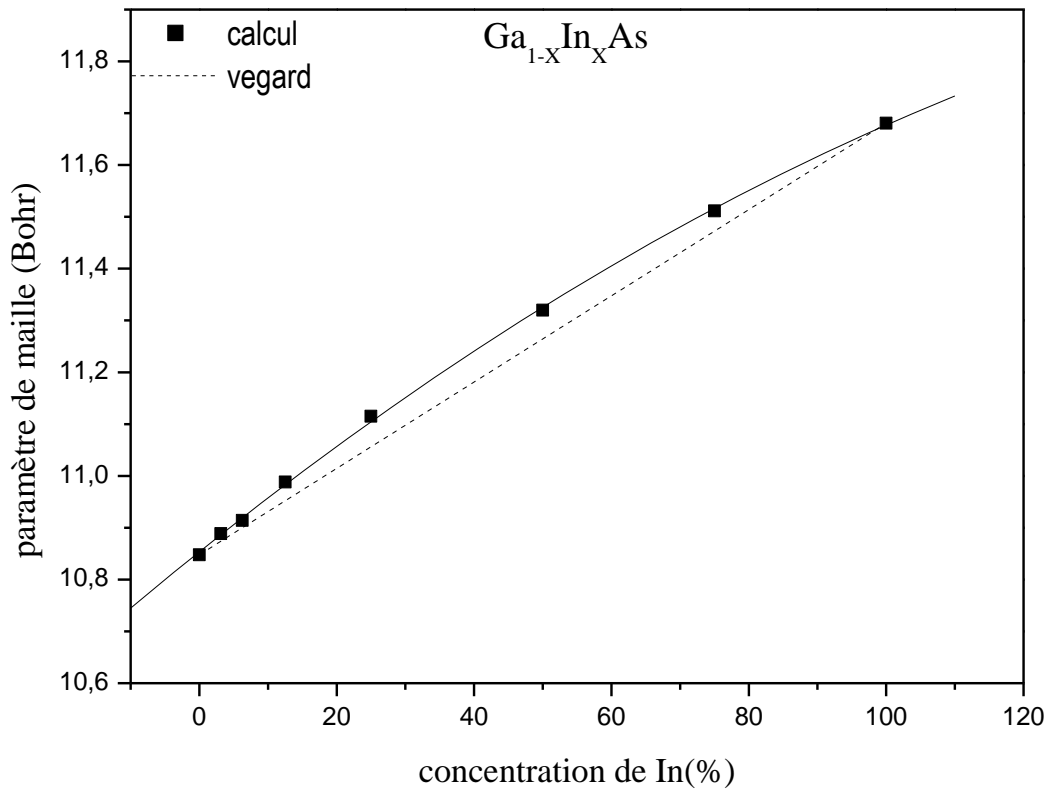


Figure II.7: Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'In (%).

II.4 Effet de la contrainte biaxiale sur la couche $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{As} / \text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$:

La figure II.8 représente le champ d'anisotropie nécessaire pour orienter l'aimantation suivant une direction difficile en fonction de la tension biaxiale ϵ_{xx} . Le symbole $[100] \rightarrow [001]$ indique que l'axe facile est suivant $[100]$ alors que le champ est appliqué dans la direction $[001]$.

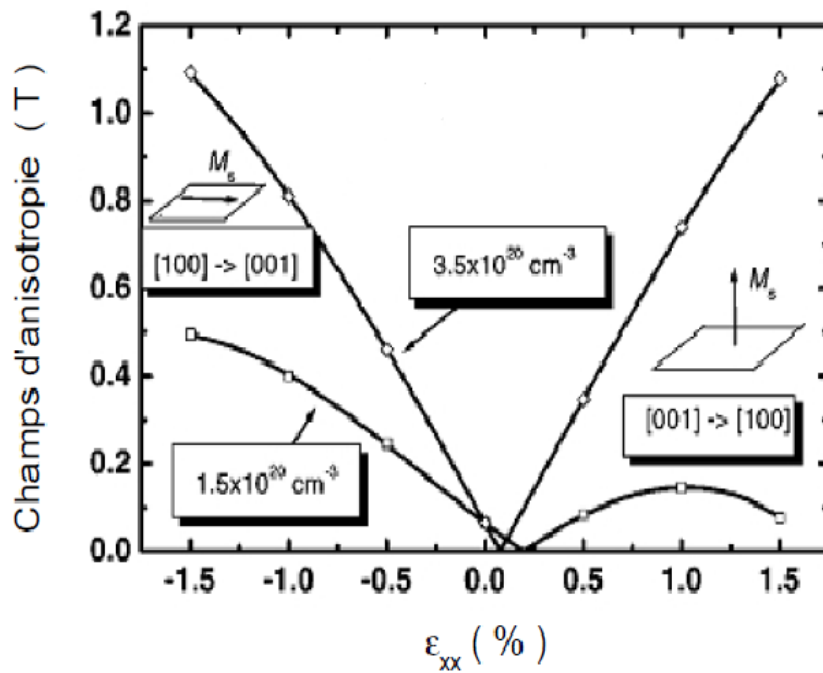


Figure II.8: Effet des contraintes sur l'anisotropie magnétique [22].

Les contraintes d'épitaxies contrôlent les propriétés magnétique qui résultant de l'échange induit par les trous. Selon les propriétés de l'effet Hall anormal, les couches $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ont une tension qui peut contrôler la direction des axes de facile aimantation. La concentration de l'indium impose une aimantation perpendiculaire est hors du plan. Mais dans le cas d'une compression $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$, elle reste confinée dans le plan (figure II.9) [21].

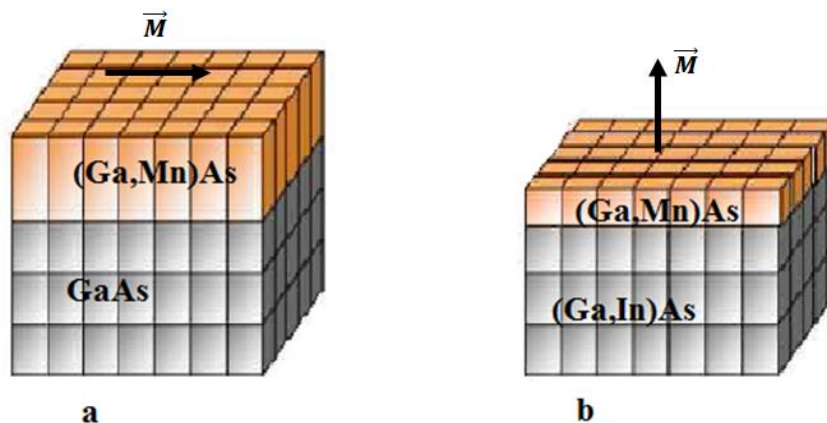


Figure II.9: Couches magnétiques sous contraintes. a) Couche GaMnAs sous compression b) Couche GaMnAs en tension).

Il existe trois paramètres qui peuvent contrôler le phénomène de contrainte d'épitaxie :

- a- Le potentiel de déformation $b_{\text{def}} = -1.7\text{eV}$ [23].
- b- Les valeurs des constantes élastiques C_{ij} et le module d'élasticité C_{12}/C_{11} . Les valeurs calculées pour le cas du GaMnAs en utilisant le code Wien2k, sont regroupées dans le tableau II.3

	C_{ij} (GPa)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{12}/C_{11}
GaMnAs	Notre calcul	131.9143	28.2789	90.7153	0.2143
	Autre calcul	118.8 ^[24]	53.2 ^[24]	59.4 ^[24]	0.447 ^[24]

Tableau II.3 : Constantes élastiques et module d'élasticité du matériau GaMnAs.

- c- La différence Δa entre paramètre des mailles du substrat et de la couche magnétique.

Il existe trois principales composantes dans le tenseur des contraintes : Deux composantes dans le plan des couches, elles sont équivalentes dans les deux directions X et Y, données par :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{\Delta a}{a} = \frac{a_0 - a}{a}$$

a_0 : Paramètres de maille du substrat GaInAs.

a : Paramètres de maille de la couche GaMnAs.

Une tension perpendiculaire suivant la direction de croissance :

$$\varepsilon_{zz} = -2\varepsilon_{xx} \frac{C_{12}}{C_{11}}$$

Les valeurs calculées sont regroupées dans le tableau II.4:

$\times 10^{-3}$	Concentration d'In (%)							
	0	3.125	6.25	12.5	25	50	75	100
ϵ_{xx}	-0,221	3,52	5,90	12,71	24,40	43,29	60,93	76,53
ϵ_{zz}	0,094	-1,51	-2,53	-5,45	-10,46	-18,55	-26,11	-32,8

Tableau II.4: Variation de la contrainte ϵ_{xx} et ϵ_{zz} en fonction de la concentration d'In (%).

Les composantes ϵ_{xx} , ϵ_{yy} et ϵ_{zz} de la contrainte d'épitaxie sont calculées en fonction de la concentration de l'indium. Les résultats du calcul représentés par la figure II.10.a montrent des valeurs positives de ϵ_{xx} et ϵ_{yy} pour des concentrations supérieures à une valeur critique $x > 0.33\%$, ce qui explique que les couches magnétiques subissent une contrainte de tension suivant les directions x et y dans le plan. Au contraire, pour des concentrations inférieures à cette valeur les couches magnétiques subissent une contrainte de compression.

Les valeurs ϵ_{zz} quant à elles sont négatives (voir figure II.10.b).

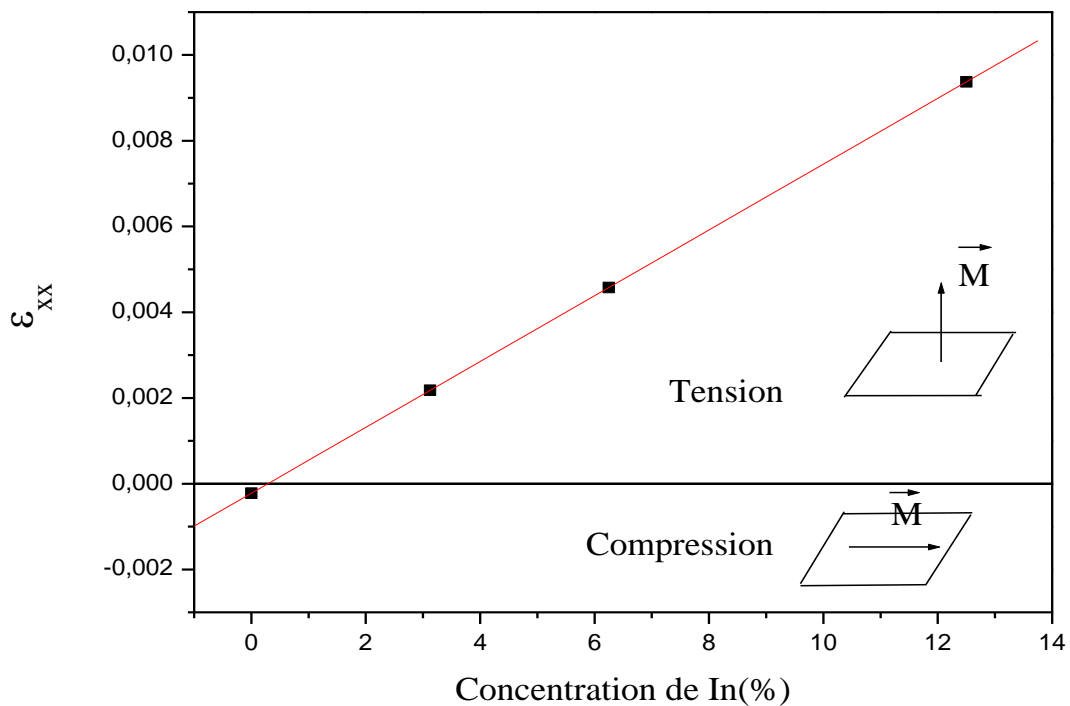


Figure II.10a: Variation de la contrainte ϵ_{xx} pour de faibles concentrations d'In (%).

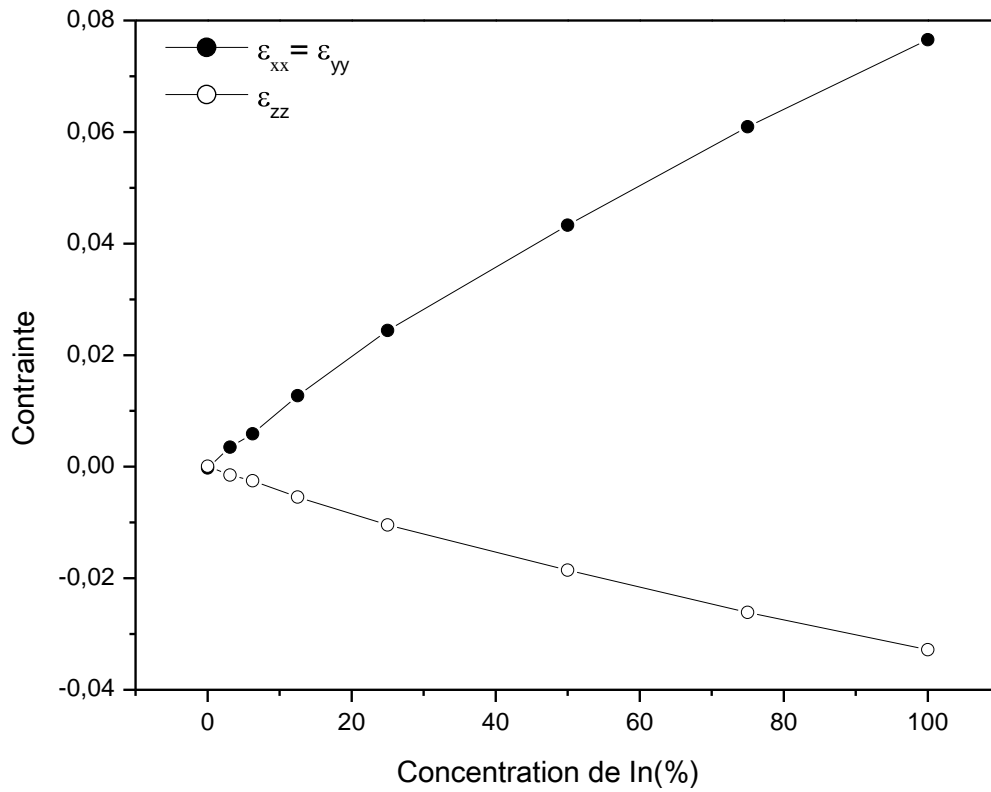


Figure II.10b: Variation des contraintes en fonction de la concentration d'In (%).

Pour des couches sous l'effet de la contrainte d'épitaxie, la constante de déformation donnée par la relation :

$$Q_{\varepsilon} = \varepsilon_{zz} - \frac{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{2}$$

Représentée dans la figure II.11, donne des valeurs négatives de la déformation Q_{ε} dans le cas du GaMnAs/GaInAs.

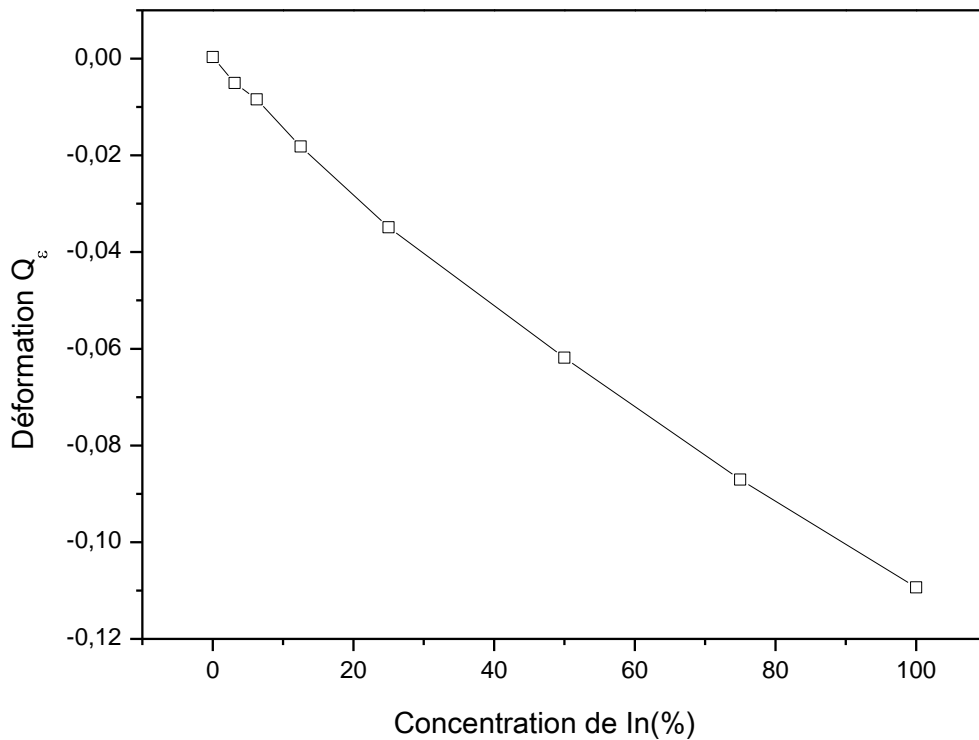


Figure II.11 : Variation des déformations en fonction de la concentration d'In.

Le décalage entre les bandes des trous lourds et des trous légers est donné par une quantité $\delta E = 2b_{\text{def}}Q_e$. L'écart est plus important que la concentration d'indium est plus grande (voir la figure II.12). On voit aussi que ce décalage est négatif dans le cas d'absence d'Indium (voir le zoom de la figure II.12), les couches subissent une compression et le décalage des bandes des trous lourds et des trous légers est positif.

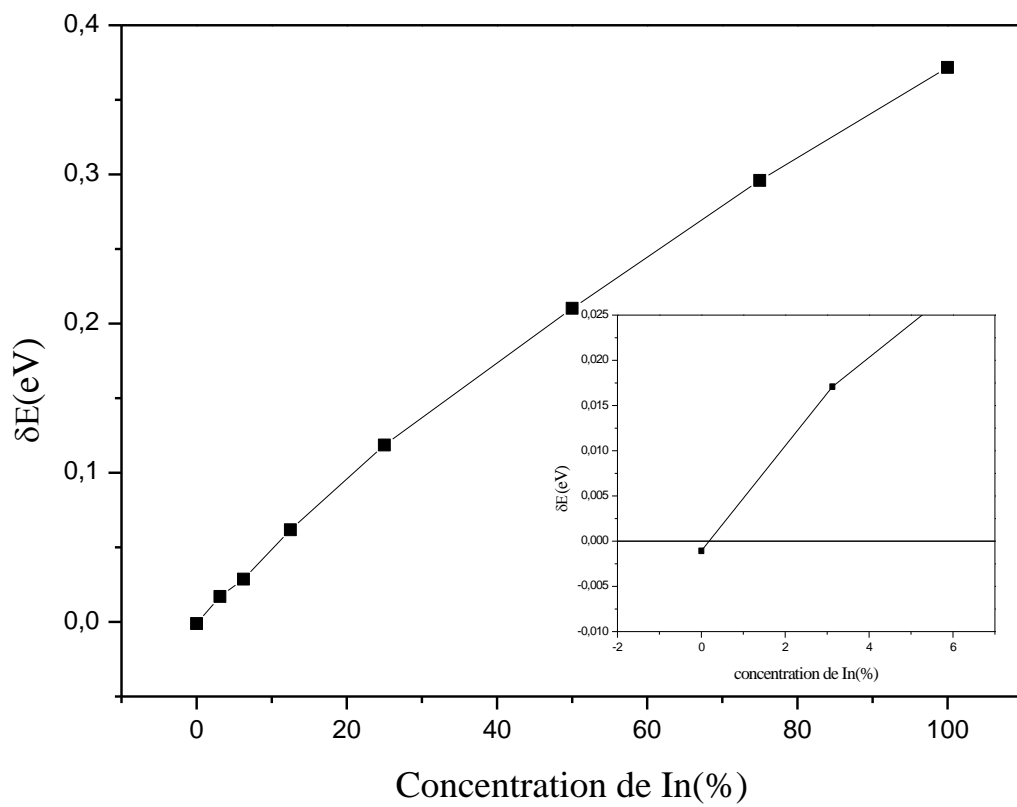


Figure II.12 : Décalage énergétique en fonction des concentrations d'In.

CONCLUSION GENERALE

Les films (Ga,Mn)As ne peuvent être déposés que sur des substrats bien appropriés, tels que le GaAs ou le (Ga,In)As. Des mesures de diffraction des rayons X ont montré que les constantes de réseau hors plan de films de (Ga,Mn)As dépendent sensiblement des constantes de réseau du substrat sous-jacent, cela suite au désaccord de maille entre le (Ga,Mn)As et le substrat. De même, la constante de réseau dans le plan est liée à celle du substrat, et le film est soit sous tension ou sous contrainte de compression. Dans ce travail, par un calcul ab-initio, on s'est intéressé à l'effet de la concentration d'Indium sur la couche (Ga,Mn)As.

Nous avons débuté notre étude par l'optimisation des composés binaires GaAs et InAs dans la structure zinc blende, dans le but de déterminer leurs propriétés structurales (pas du réseau, module de rigidité ainsi que sa dérivée première). Les résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

Afin de prévoir l'effet de la contrainte sur les couches de (Ga,Mn)As/(Ga,In)As nous avons étendu le calcul des paramètres structuraux au composé GaAs dopés au manganèse (Mn) et à l'indium (In). Pour modéliser l'alliage dans la phase zinc blende nous avons utilisé une super cellule de 32, 16 et 8 atomes. En traçant la variation de l'énergie en fonction du volume du composé $G_{0.9375}Mn_{0.0625}As$ pour les deux états FM et NM, nous avons remarqué que la phase la plus stable et la phase magnétique. Les valeurs des paramètres structuraux à l'équilibre pour le $Ga_{1-x}In_xAs$ ont été tirés à partir des variations de l'énergie en fonction du volume pour différentes concentrations d'indium (3.125, 6.25, 12.5, 25, 50, et 75%). On note une faible déviation positive par rapport à la loi de Végard.

Le phénomène de contrainte d'épitaxie est contrôlé par le potentiel de déformation b_{def} , les valeurs des constantes élastiques et la différence Δa entre paramètre des mailles du substrat (GaInAs) et de la couche magnétique (GaMnAs). Le tenseur des contraintes ϵ_{xx} , ϵ_{yy} et ϵ_{zz} dans les directions X, Y et Z sont fonctions de ces paramètres. Le calcul montre des valeurs positives dans les directions X et Y pour des concentrations supérieures à une valeur critique, où l'aimantation est hors plan (perpendiculaire). Dans le cas contraire cette aimantation reste confinée dans le plan de la couche GaMnAs. Les valeurs ϵ_{zz} quant à elles restent négatives.

On s'est intéressé aussi au calcul de la constante de déformation qui Q_e donne des valeurs négatives. Le décalage δE entre les bandes des trous lourds et des trous légers croît avec la concentration d'indium. Ce décalage devient négatif dans le cas d'absence d'Indium.

Références bibliographiques

- [1] S. Kamara, thèse de doctorat, université de Montpellier II, France (2010).
- [2] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, and Y. Iye, *Appl. Phys. Lett.* 69, 363 (1996).
- [3] M. Wang, R. P. Champion, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, C. T. Foxon, and B. L. Gallagher, *Appl. Phys. Lett.* 93, 132103 (2008).
- [4] K. Olejník, M. H. S. Owen, V. Novák, J. Mašek, A. C. Irvine, J. Wunderlich, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. B* 78, 054403 (2008).
- [5] C. Cyr, Thèse de PhD, Université de Laval, Canada (2007).
- [6] A. Mansri, thèse de Doctorat, Université de Badji Mokhtar, Algérie, (2014)
- [7] J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge university press, (2010).
- [8] N. Chakri, thèse de doctorat, Université de Badji Mokhtar, Algérie, (2007).
- [9] M. B. Morales, thèse de Master, Université de Philippines, (2004).
- [10] S. Daoud, thèse de doctorat, Université de Sétif, Algérie (2013).
- [11] K. Daoud, thèse de doctorat, Université de Sétif, Algérie (2012).
- [12] J. Calatayud, thèse de doctorat, Université de Montpellier, France (1992).
- [13] K. Rerbal, thèse de Magister, Université d'Oran Es-sénia, Algérie, (1993).
- [14] T. Bouragba, thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, France (2006).
- [15] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, *Wien2k, Techn. Universität (Autriche)* (2001).
- [16] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* 45, 13244 (1992).
- [17] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett* 77, 3865 (1996).
- [18] F. D. Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 30, 5390 (1944).
- [19] H. Arabi et al. , *Physica B* 373, 16–22 (2006).
- [20] O. Madelung (Ed.), *Semiconductors, Group IV Elements and III–V Compounds*, Landolt–Bornstein, New Series, Group III, vol. 17, Pt.a, Springer, Berlin, (1991).
- [21] M. Dehbaoui, thèse de doctorat, Université Montpellier, (2013).
- [22] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura, *Phys. Rev. B*, 63 (2001).
- [23] D. Bimberg, R. Blachnik, M. Cardona, P. J. Dean, T. Grave, G. Harbeke, K. Huebner, U. Kaufmann, W. Kress, O. Madelung, W. von Muench, U. Roessler, J. Schneider, and M. Schulz. *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. O. Madelung, M. Schulz, and W. Weiss, Landolt-Bornstein, New Series, Group III, 17(Pt. a), (1982).
- [24] HJ McSkimin, A Jayaraman, and P Andreatch, *Journal of applied Physics*, 38 (5) (1967).