

Depuis les débuts de la microélectronique, la fonction de traitement des données est dissociée de la fonction de stockage de l'information. Cette distinction s'est imposée naturellement pour des raisons technologiques. En effet, la fonction de calcul et de traitement des données est assurée par des composants utilisant des transistors à base de matériaux semiconducteurs. Dans ces composants, l'information est véhiculée par des courants de charges dans des canaux de conduction. La seconde fonction, le stockage des informations, est en revanche réalisé sur des médias magnétiques, où l'information est codée dans l'aimantation des matériaux magnétiques, c'est-à-dire dans le spin des électrons de la couche d'atomes magnétiques qui les constituent. Si dans les unités de calcul, les propriétés de spin des porteurs ne sont pas utilisées, de la même façon, dans les matériaux magnétiques utilisés pour le stockage des données, les propriétés de conduction des électrons ne sont pas mises à profit.

Depuis une vingtaine d'années, on assiste à un rapprochement de ces deux technologies et de leur physique respective au sein d'une nouvelle discipline : l'électronique de spin ou spintronique. En effet, cette discipline se fixe pour but la réalisation de dispositifs dans lesquels sont utilisées à la fois les propriétés de charge et de spin des porteurs. L'impact de cette nouvelle branche de l'électronique est déjà considérable, dans la mesure où toutes les têtes de lecture des disques durs actuels sont constituées de vannes de spin, l'un des premiers dispositifs appliqués issu de la spintronique. De plus, l'attribution en 2007 du prix Nobel de physique à Albert Fert et Peter Grünberg pour la découverte de l'effet GMR, effet sur lequel sont basées les vannes de spin, montre également l'intérêt croissant porté par la communauté scientifique à l'électronique de spin.

Aujourd'hui, l'électronique de spin est à la recherche de nouveaux matériaux permettant de répondre à un certain nombre de défis technologiques qui conditionnent la réalisation de nouveaux dispositifs. Parmi ces matériaux, les matériaux semi-conducteurs magnétiques font désormais l'objet de nombreuses études. En effet, le dopage d'un semi-conducteur avec un élément magnétique est susceptible de lui conférer les propriétés d'un matériau ferromagnétique, tout en conservant le caractère semi-conducteur. Cela permet de manipuler l'état de spin des porteurs ainsi que la densité de porteurs, par l'intermédiaire de champs magnétiques et électriques.

Dans ce type de matériau, le système d'électrons organisés en bandes est couplé au système d'ions magnétiques (caractérisés par leur moment magnétique) qui sont aléatoirement dispersés dans la maille cristalline de semi-conducteur.

Les deux systèmes interagissent fortement entre eux à cause des interactions d'échange. C'est pour cela que l'étude des propriétés optiques et magnétiques de ces matériaux est indissociable. Une bonne connaissance des propriétés optiques du semi-conducteur est indispensable. Elle facilite en effet la compréhension des mécanismes d'interaction entre les électrons de bande et les spins portés par les ions magnétiques.

Suivent le type de semi-conducteur les interactions entre les électrons et les spins des ions magnétiques et donc les propriétés optiques et magnétiques de ces matériaux, vont être très différentes. On peut en effet jouer, en changeant le semi-conducteur hôte, sur la largeur de bande interdite. La concentration en ions magnétiques va aussi profondément changer les propriétés optiques et magnétiques : en effet, si la concentration est très faible (inférieure à 1%), les ions magnétiques vont être considérés comme isolés, donc sans interaction entre eux. Si en revanche la concentration est importante, les ions magnétiques vont interagir entre eux (interaction d'échange).

En comparaison avec les composés de la colonne II-B, tels que ZnO et CdO, les semi-conducteurs à base de manganèse présentent des propriétés électroniques et des mécanismes de liaison très différentes. Cette différence était attribuée à l'existence d'une bande métallique  $d$  à l'intérieur de la bande de valence dans les composés de la colonne II-B. Le rôle des états  $d$  dans les semi-conducteurs (II - VI) a été largement étudié. L'existence d'une bande métallique  $d$  dans les principales bandes de valence affecte fortement les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de ces matériaux.

Depuis la dernière décennie, on a vu l'émergence de nouvelles méthodes de simulation et de modélisation numérique très avancées dans le calcul des structures électroniques des solides dites méthodes *ab-initio* ou de premiers principes. Le succès de ces méthodes s'explique par le fait qu'elles permettent de prédire dans une large gamme de matériaux et avec une précision de quelques pourcents la plupart des propriétés simulables par un volume de quelques centaines d'atomes. L'avantage de ces méthodes *ab-initio* se situe dans le fait qu'elles ne nécessitent pas l'emploi de paramètres ajustables sur des propriétés connues expérimentalement des solides et ne prennent en compte que les caractéristiques de base (masse, nombre de charges, structure atomique,.....) des éléments considérés. La théorie de la fonction de la densité (DFT) est bien connue dans le monde des physiciens, mais cette célébrité 'est pas faite au hasard, elle est la méthode la plus dominante, car c'est une version moderne des approximations de calculs qui s'attachent essentiellement à contourner le

problème de N-corps qui a demeuré si longtemps sans solution. Elle est basée sur la densité d'électron plutôt que sur la fonction d'onde.

Dans ce présent travail nous portons notre attention sur le calcul des propriétés électroniques et magnétiques des alliages ternaires ZnMnO et CdMnO en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéairement FP-LAPW dans sa version « full potentiel », qui tire ses origines de la méthode des ondes planes augmentées APW et sa version améliorée LAPW. En effet, cette méthode a prouvé être une des méthodes les plus exactes en ce qui concerne le calcul de la structure électronique des solides et ceci en se basant sur la DFT.

Le potentiel d'échange et de corrélation est calculé en utilisant l'Approximation du Gradient Généralisé GGA paramétrisée récemment par Z. Wu et R. E. Cohen. Cette approximation a apporté la solution qui permet aux méthodes quantiques, dites aussi méthodes de premiers principes, de se développer et d'arriver à un stade très élaboré. Il est possible actuellement de calculer l'énergie totale, la structure de bande, la densité d'états et la densité de charge.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à deux familles ZnMnO et CdMnO, dans la structure wurtzite, avec une concentration du Mn de 25%. L'utilisation de la méthode FP-LAPW nous a permis en particulier d'étudier les propriétés structurales, électroniques et magnétiques.

Dans le premier chapitre, nous donnerons des généralités sur les phénomènes rencontrés dans ce type de matériaux tels que le magnétisme et des notions sur la structure wurtzite. Nous décrirons les propriétés des systèmes magnétiques dilués et nous donnerons une description des interactions d'échange p-d entre les électrons des bandes de valence et les électrons 3d, ainsi que l'échange d-d entre les ions magnétiques.

Le deuxième chapitre sera consacré à la théorie de la fonctionnelle de la densité et une description de la méthode (FP-LAPW).

Dans le troisième chapitre, nous récapitulerons nos résultats obtenus lors de notre étude, leurs interprétations ainsi que la comparaison avec certains travaux théoriques et expérimentaux disponibles et finalement on terminera par une conclusion qui permettra de faire une synthèse des différents résultats obtenus sur la base de nos considérations physiques.