N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE&POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR &DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DJILLALI LIABES

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

SIDI BEL ABBES

THESE DE DOCTORAT

Présentée par : **DOUMI BENDOUMA**

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **PHYSIQUE DES MATERIAUX**

Intitulé

Investigations par les méthodes du premier principe des Propriétés Structurales, Electroniques et Magnétiques de $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$: (M=Fe, Mn)

Soutenue le : ***29 avril 2013***

Devant le jury composé de :

Président :	Mr. ABBAR Boucif	Pr.	UDL de Sidi Bel-Abbès
Examinateurs :	Mr. ZANOUN Yahia	Pr.	Université d'Oran
	Mr. BENHELAL Omar	Pr.	UDL de Sidi Bel-Abbès
	Mr. KHENATTA Rabah	Pr.	Université de Mascara
Encadreur :	Mr. TADJER Abdelkader	Pr.	UDL de Sidi Bel-Abbès

©Copyright by DOUMI Bendouma, 2013

Abstract

We investigate the structural, electronic, and magnetic properties of (M= Fe, Mn)-based zinc blende diluted magnetic semiconductors (DMS) $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ for (x= 0.0625, 0.125, 0.25), using first-principles calculations with the full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) method within the density functional theory and local spin-density approximation. The analysis of electronic structures and magnetic properties show that $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ at (x = 0.0625, 0.125, 0.25) are magnetic insulators, and $In_{1-x}Mn_xN$ at (x = 0.0625, 0.125) are metallic in nature. On the other hand the $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ at (x = 0.0625, 0.125, 0.25) and $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ are half-metallic ferromagnets with magnetic spin polarization of 100%, where the ferromagnetic ground states result from a double-exchange mechanism, and these compounds are predicted to be good candidates for spintronic applications.

Keywords: ***Spintronics - Half-metals - Double-exchange mechanism - (Fe, Mn) doped III–V nitrides***

Résumé

Nous étudions les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des matériaux $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ (M= Fe, Mn) basés sur la structure zinc blende des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) pour (x = 0.0625, 0.125, 0.25), en utilisant les calculs des premiers principes avec la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité et l'approximation de la densité de spin locale. L'analyse des structures électroniques et des propriétés magnétiques montrent que $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125, 0.25) sont des isolants magnétiques, et $In_{1-x}Mn_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125) sont de nature métallique. D'autre part $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125, 0.25) et $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ sont des demi-métalliques ferromagnétiques avec une polarisation en spin magnétique de 100%, où l'état ferromagnétique résulte du mécanisme de double échange, et ces composés semblent être de bons candidats pour les applications de spintronique.

Mots-clés: ***Spintroniques - Demi-métalliques - Mécanisme de double échange - (Fe, Mn) dopés III-V Nitrures***

ملخص

نقوم بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية و المغناطيسية للمركبات $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ (M= Fe, Mn) على أساس البنية زانك بلاند للنصف النواقل المغناطيسية المخففة (DMS) من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25)، بإستعمال حسابات المبدأ الأول مع طريقة الأمواج المسطحة المدمجة الخطية في إطار نظرية تابعة الكثافة و تقريب كثافة السبين المحلية. تحليل البنيات الإلكترونية و الخصائص المغناطيسية يبين أن المركبات $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25) تعتبر عوازل مغناطيسية، و $In_{1-x}Mn_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125) ذات طبيعة معدنية. علاوة على ذلك فإن $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25) و $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ هي مركبات نصف-معدنية مغناطيسية مع إستقطاب مغناطيسي سبيني بنسبة 100%. حيث أن الحالة الفيرومغناطيسية ناتجة من آلية التبادل المزدوج، و هذه المركبات تبدو أنها مرشحة جيدة لتطبيقات السبينترونيك.

الكلمات المفتاحية: ***السبينترونيك، نصف-معدنية ، آلية التبادل المزدوج، (Fe, Mn) مطعمة III-V نيتريدات.***

Abstract

We investigate the structural, electronic, and magnetic properties of (M= Fe, Mn)-based zinc blende diluted magnetic semiconductors (DMS) $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ for (x= 0.0625, 0.125, 0.25), using first-principles calculations with the full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) method within the density functional theory and local spin-density approximation. The analysis of electronic structures and magnetic properties show that $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ at (x = 0.0625, 0.125, 0.25) are magnetic insulators, and $In_{1-x}Mn_xN$ at (x = 0.0625, 0.125) are metallic in nature. On the other hand the $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ at (x = 0.0625, 0.125, 0.25) and $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ are half-metallic ferromagnets with magnetic spin polarization of 100%, where the ferromagnetic ground states result from a double-exchange mechanism, and these compounds are predicted to be good candidates for spintronic applications.

Keywords: *Spintronics - Half-metals - Double-exchange mechanism - (Fe, Mn) doped III–V nitrides*

Résumé

Nous étudions les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des matériaux $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ (M= Fe, Mn) basés sur la structure zinc blende des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) pour (x = 0.0625, 0.125, 0.25), en utilisant les calculs des premiers principes avec la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité et l'approximation de la densité de spin locale. L'analyse des structures électroniques et des propriétés magnétiques montrent que $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125, 0.25) sont des isolants magnétiques, et $In_{1-x}Mn_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125) sont de nature métallique. D'autre part $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ aux (x = 0.0625, 0.125, 0.25) et $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ sont des demi-métalliques ferromagnétiques avec une polarisation en spin magnétique de 100%, où l'état ferromagnétique résulte du mécanisme de double échange, et ces composés semblent être de bons candidats pour les applications de spintronique.

Mots-clés: *Spintroniques - Demi-métalliques - Mécanisme de double échange - (Fe, Mn) dopés III-V Nitrures*

ملخص

نقوم بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية و المغناطيسية للمركبات $(Al, Ga, In)_{1-x}M_xN$ (M= Fe, Mn) على أساس البنية زانك بلاند للنصف النواقل المغناطيسية المخففة (DMS) من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25)، بإستعمال حسابات المبدأ الأول مع طريقة الأمواج المسطحة المدمجة الخطية في إطار نظرية تابعة الكثافة و تقريب كثافة السبين المحلية. تحليل البنيات الإلكترونية و الخصائص المغناطيسية يبين أن المركبات $(Al, Ga, In)_{1-x}Fe_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25) تعتبر عوازل مغناطيسية، و $In_{1-x}Mn_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125) ذات طبيعة معدنية. علاوة على ذلك فإن $(Al, Ga)_{1-x}Mn_xN$ من أجل (x = 0.0625، 0.125، 0.25) و $In_{0.75}Mn_{0.25}N$ هي مركبات نصف-معدنية مغناطيسية مع إستقطاب مغناطيسي سبيني بنسبة 100%. حيث أن الحالة الفيرومغناطيسية ناتجة من آلية التبادل المزدوج، و هذه المركبات تبدو أنها مرشحة جيدة لتطبيقات السبينترونيك.

الكلمات المفتاحية: *السبينترونيك، نصف-معدنية ، آلية التبادل المزدوج، (Fe, Mn) مطعمة III-V نيتريدات.*