

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République algérienne démocratique et populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
جامعة عين تموشنت بلحاج بوشعيب
Université –Ain Temouchent- Belhadj Bouchaib
Faculté des Sciences et de Technologie
Département Science de la matière



Projet de Fin d'Etudes
Pour l'obtention du diplôme de Master en : Physique
Domaine : Science de la matière
Filière : Physique
Spécialité : Physique des matériaux
Thème

L'effet des impuretés magnétiques sur les propriétés
électroniques et magnétiques de l'Oxide d'Europium

Présenté Par :

Melle. Benkhelifa Djihene

Devant le jury composé de :

Pr Abdessalam Boucif	Pr	UAT.B.B (Ain Temouchent)	Président
Dr Dine El Hannani Mohammed	MCB	UAT.B.B (Ain Temouchent)	Examineur
Pr Bensiad Djillali	Pr	UAT.B.B (Ain Temouchent)	Encadrant
Dr Hebri Salem	MCB	UAT.B.B (Ain Temouchent)	Invité

Année Universitaire 2020/2021



Dédicace

Que Dieu le Tout Puissant vous garde et vous procure santé et bonheur.

Je dédie ce modeste travail :

*À ma mère ! je te serai reconnaissant toute ma vie, qu'Allah t'accorde
longue vie dans la santé ! Grâce à toi maman j'ai appris le sens du travail et
de la responsabilité. Je voudrais te remercier pour ton amour, ta générosité.*

*À mes chère frères FELHI et SOFIANE à tous les moments
d'enfance que vous avez passés avec moi en gage de ma profonde estime pour
l'aide que vous m'avez apporté.*

*À mes chères sœurs et leurs enfants ! Vous êtes là pour mon bonheur
et la réussite.*

À mes amis Amina , Chaimaa et Hocine qui ma aider trop.

*Pour finir.. à mon père qui j'ai perdu à l'âge de 8ans que j'oublierais
jamais t'étais toujours dans mon cœur.*



Djihane

Remerciements



Tout d'abord, je remercie ALLAH le tout-puissant qui nous a donné la force, le courage, la volonté et la patience pour arriver à ce stade.

*Je tiens à remercier très sincèrement mon Encadreur Monsieur Professeur **BENSAID Djillali** qui m'a aidé et encouragé pour son encadrement et pour l'aide qu'il m'a prodigué pendant toute la période de la préparation du Mémoire.*

*Je tiens à exprimer également ma gratitude au Professeur **Boucif Abde Esselam** qui a accepté de présider ce jury. Je voudrais remercier le Docteur Mr **Dinne El Hannani Mohamed** qui accepte d'examiner ce travail. Et Mr le Docteur **Salem Habri**.*

Je tiens à remercier tous les enseignants qu'ont contribué à mes formations depuis l'école primaire jusqu'aux études universitaires.

*Enfin, j'exprime mes reconnaissances et ma sympathie à tous mes enseignants car si je suis là aujourd'hui c'est bien grâce à eux. Je remercie aussi l'ensemble de l'équipe pédagogique de notre **Université Belhadj Bouchaïb d'Ain Temouchent (C.U.B.B.A.T)**, pour l'intérêt qu'ils ont porté tout au long de mon cursus ainsi que pour leur aide et assistance.*

Nomenclature

Abréviations les plus couramment utilisées :

\hbar	Constante de Planck : $6.62618 \cdot 10^{-34}$ j.s	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$
e	Masse d'électron : $9,109 \cdot 10^{-31}$ Kg	
m_e	La charge élémentaire $1.602 \cdot 10^{-19}$ coulomb	
H	Hamiltonien d'un système	
E	Energie d'un système	
T	Energie cinétique Muffin-tin	
T_e	Energie cinétique des électrons	
T_n	Energie cinétique des noyaux	
V	Energie potentiel Muffin-tin	
V_{ee}	L'énergie de répulsion entre des électrons	
V_{nn}	L'énergie d'interaction entre des noyaux	
V_{ne}	Energie d'attraction entre noyaux –électrons	
V_{eff}	Potentiel extérieure effectif	
$v(r)$	Le potentiel externe	
E_{XC}	L'énergie de corrélation d'échange	
Ψ	Fonction d'onde d'un système a N particules	
ϕ_i	Fonction d'onde mono-particulaire relative à la particule i (Orbitale de Kohn Sham)	
E_f	L'énergie de formation	
E_F	Niveau de fermi	
MT	Muffin-tin	
HK	Relatif à la théorie de Hohenberg et Kohn	
KS	Relatif à la théorie de Kohn et Sham	
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité	
LDA	Approximation de la densité locale	
LSDA	L'approximation de la densité locale de spin	
GGA	Approximation du gradient généralisé	
LAPW	Les ondes planes augmentées linéarisées	
$n(r)$	Densité de charge	
GMR	Magnétorésistance géant	
TMR	Magnétorésistance tunnel	

DMS	Semi-conducteur magnétique diluée
DOS	Densité d'état
E_{HM}	Le gap demi-métallique
E_{HFM}	Le gap demi-métallique ferromagnétique
ρ_{in}	Densité initiale
ρ_{out}	Densité de charge sortante
SCF	Self Consistent Field
B_0	Module de compressibilité (Bulk modulus)
B'	Dérivée par rapport à la pression du module de compressibilité

Liste des figures

Figure	Titre	Page
<i>Chapitre I</i>		
Figure I.1	C'est en effet l'association des 2 types de semi-conducteurs qui permet la réalisation des deux applications qui sont à la base de l'électronique moderne : la diode et le transistor.	6
Figure I.2	Le Tableau périodique des éléments.	8
Figure I.3	L'illustration schématique des phases de NaCl , ZB et CsCl de EuO.	12
Figure I.4	1) reproduction des résultats de Albert et Fert montrant une magnétorésistance qui s'élève à plus que 80%. 2) Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante. (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.	14
Figure I.5	schéma représentatif du fonctionnement d'une jonction magnétorésistive par effet tunnel (TMR)	15
Figure I.6	Double échange. Cas de deux ions Mn^{4+} et Mn^{3+} séparés par un ion oxygène. Au même moment où un électron de l'ion Mn^{4+} saute vers l'oxygène, celui-ci un électron vers l'autre ion Mn. Ceci n'est possible que si les deux ions de Mn ont leurs spins parallèles.	17
Figure I.7	Schéma 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 . ↑ et ↓: l'orientation de moments magnétiques.	18

<i>Chapitre II</i>		
Figure II.1	Le schéma du calcul self consistant de la fonctionnelle de densité.	41
Figure II.2	L'organigramme du code WIEN2k	43
<i>Chapitre III</i>		
Figure III.1	Variations des énergies totales en fonction des volumes des matériaux EuO et $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$. (a) EuO, (b) $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, (c) $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.	48
Figure III.2	représente la variation de (d) l'énergie de la cellule tétragonale en fonction de rapport c/a, (e) l'énergie de la cellule en fonction de volume.	48
Figure III.3	Structure cristalline de composé EuO	49
Figure III.4	Structure cristalline de composé $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ (a) $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$. (b) $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$. (c) $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$.	51
Figure III.5	Les structures de bande des spins Up et spins Down de EuO.	54
Figure III.6	Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$.	55
Figure III.7	Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$.	55
Figure III.8	Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.	56
Figure III.9	Les DOS des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$	58
Figure III.10	Les DOS des spins up et spins dn de $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$	59
Figure III.11	Les DOS des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$	61

Liste des tableaux

	Titre	Page
<i>Chapitre I</i>		
Tableau I.1	Les éléments lanthanides.	7
Tableau I.2	Information Générales de L'euporium.	9
Tableau I.3	Propriétés atomiques de L'euporium.	9
Tableau I.4	Information Générales de L'oxygène.	9
Tableau I.5	Propriétés atomiques de L'oxygène.	10
Tableau I.6	Information Générales de Chrome.	10
Tableau I.7	Propriétés atomiques de Chrome.	10
<i>Chapitre III</i>		
Tableau III.1	les énergies de formations de composées $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.	50
Tableau III.2	Les paramètres de réseau (α_0), les modules de compressibilités (B), et leurs premières dérivées (B') des composés. EuO et $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.	52
Tableau III.3	Les moments magnétiques total et partiels des atomes Cr,Eu,O qui constitue les composés $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$,et l'énergie E_{HM} et E_{HFM} .	62
Tableau III.4	Les constantes d'échanges des composés $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.	63

Table des matières

Titre	Page
Dédicace	I
Remerciements	II
Nomenclature	III
Liste des figures	IV
Liste des tableaux	V
Introduction général	1
Références	3
<i>Chapitre I : Généralité sur les semi-conducteurs</i>	
I.1 Généralité d'un semi-conducteur	5
I.1.1 Introduction	5
I.1.2 Semi-conducteur	5
I.1.3 Avantage des semi-conducteurs dopés	6
I.1.4 Les oxydes de semi-conducteurs	6
I.1.5 Les semi-conducteurs à base de terre rare	7
I.2 Les composantes de nos matériaux	8
a) Europium	8
b) L'oxygène	9
c) Chrome	10
I.3 Monoxyde d'Europium (EuO)	11
I.3.1 Caractérisation	11
I.3.2 Propriétés	11
I.4 Les Semi conducteurs magnétiques	12
I.4.1 L'électronique de spin	12
I.4.2 La magnétorésistance géante (GMR)	13
I.4.3 La magnétorésistance tunnel (TMR)	14
I.5 Semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS)	15
I.5.1 Mécanismes d'interactions d'échange dans le DMS	15

a) Echange direct	15
b) Super-échange	16
c) Echange indirect	16
d) Double échange	16
e) RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida)	17
f) Interaction d'échange s-d et p-d	18
I.6 Les semi-conducteurs Demi-métalliques ferromagnétiques	19
I.7 L'objectif de notre étude	19
Références	20
<i>Chapitre II : Méthode de calcul</i>	
Introduction	25
II.1 Théorie fonctionnelle de la densité	25
II.1.1 Equation de Schrödinger	25
II.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer	27
II.1.3 Approximation de Hartree-fock	27
II.2 La théorie fonctionnelle de la densité	29
II.2.1 Théorème de Hohenberg-Kohn	29
II.2.2 Les équations de Kohn-Sham	30
II.2.3 Théorie fonctionnelle de la densité de spin	32
II.2.4 L'approximation de la densité de spin locale	33
II.2.5 L'approximation des gradients généralisés	33
II.2.6 Effet de la correction d'Hubbard	34
II.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW)	34
II.4 La Méthode APW+Lo	38
II.5 Le calcul du plein potentiel (FP-LAPW)	39
II.6 Self consistant de la fonctionnelle de densité	40

II.6.a) Code Wien2k	41
II.6.b.Cycle SCF	42
Références	44
<i>Chapitre III : Résultat et discussion</i>	
Introduction	46
III.1.Détail de calcul	46
III.2. Propriété structurale des composé EuO et $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$	48
III-2.1-Monoxyle de l'euprium EuO	48
III-2.2. Structure $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$	49
a-L'énergie de formation	49
b.Présentation de structure $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$	50
III.3.Propriétés électroniques	52
III.3.1-Structure de bande	53
III.3.2.Densité d'états électroniques (DOS)	56
III.4.Propriétés magnétiques des matériaux $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$	61
III.4.1.Moments magnétiques	61
III.4.2.Interaction d'échanges	62
Références	64
Conclusion général	65

The background of the slide is white and decorated with several black graduation caps (mortarboards) and scattered gold confetti. The caps are positioned at various angles, some with their tassels hanging down. The confetti consists of small, curly gold streamers and tiny gold dots, creating a celebratory atmosphere.

Introduction

Introduction

Introduction générale :

La recherche de nouveaux matériaux avec des propriétés physiques spécifiques est un enjeu majeur dans le monde de l'industrie actuelle. Un des meilleurs exemples qu'on peut donner est la prédiction de matériaux destinés à la spintronique ; cette branche de la physique, qui pourrait déclencher la prochaine révolution dans le monde de l'électronique [1].

La spintronique, ou électronique de spin, implique l'étude du contrôle actif et de la manipulation des degrés de liberté de spin dans les systèmes à semi-conducteurs [2]. C'est une nouvelle technologie émergente permettant de nombreuses applications dans le domaine du stockage des données [3] ; la première percée largement reconnue de la spintronique a été l'exploitation de la magnétorésistance géante (GMR), une technologie qui est maintenant utilisée dans les têtes de lecture de la plupart des disques durs. La découverte de la magnétorésistance géante (GMR) a été citée comme la première démonstration d'une application de spintronique et a reçu le prix Nobel de physique en 2007[4].

Ces dernières années, beaucoup de chercheurs se sont investis dans la recherche et le développement des matériaux destinés à l'électronique polarisée en spin. Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) forment une nouvelle classe de matériaux magnétiques, qui remplissent l'écart entre les ferromagnétiques et les semi-conducteurs. Parmi ces matériaux on a les éléments de terres rares (La, Ce, Pr, **Eu**, Er...), ces métaux sont devenus très critiques pour plusieurs technologies modernes allant des téléphones portables et des téléviseurs aux ampoules LED et aux éoliennes [5].

L'euporium est un métal qui peut adopter trois états de valence stables, Eu^{2+} dans le monoxyde d'euporium (EuO , structure de rock salte NaCl , groupe spatial $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$) [6], $\text{Eu}^{2/3+}$ dans Eu_3O_4 (structure orthorhombique, groupe spatial Pnma) [7] et Eu^{3+} dans Eu_2O_3 (structure monoclinique ou cubique, groupes spatiaux C2/m ou $\text{Ia}\bar{3}$, respectivement) [8,9].

Parmi ces phases, EuO est le composé scientifiquement le plus intéressant, principalement parce qu'il s'agit d'un exemple rare de semi-conducteur ferromagnétique à haute aimantation ($7\mu_B$ par Eu ; $T_C = 69 \text{ K}$) [10] qui peut être intégré pratiquement avec du silicium, GaAs , GaN , graphène, diamant et de nombreux substrats d'oxyde. C'est un demi-métal avec une polarisation de spin de plus de 96% et sa conductance peut être adaptée au silicium par dopage aux terres rares, ce qui en fait un candidat idéal pour les applications spintroniques [11,15]. De plus, il présente une pléthore de propriétés géantes de transport et magnéto-optique, ce qui en fait un matériau fascinant pour la recherche fondamentale ainsi que pour les

applications de dispositifs [16,17]. Il est utilisé aussi dans la composition de luminophores, substances qui émettent de la lumière lorsqu'elles sont soumises à une excitation extérieure ; Ces luminophores contenant des terres rares se retrouvent dans les lampes à basse consommation, les écrans plats à cristaux liquides (LCD) [18], les écrans plasma...

Le but de ce mémoire est d'étudier la structure électronique et les propriétés magnétiques de semi-conducteur EuO ainsi que EuO dopé Cr.

Le mémoire s'organise autour de trois chapitres :

Chapitre 1 :

Ce chapitre offre un aperçu de la synthèse expérimentale de l'oxyde d'euporium et le développement de la spintronique à travers le semi-conducteur dopé par des impuretés magnétiques.

Chapitre 2 :

Dans ce chapitre nous présentons la méthode de calcul qui va permettre l'étude de la structure électronique. La théorie de la fonctionnelle densité et les différentes approximations utilisées dans ce mémoire.

Chapitre 3 : Ce chapitre est voué à l'étude et l'interprétation des propriétés structurales ainsi que la discussion de la structure de bande et la densité d'états et en fin le traitement des propriétés magnétiques des EuO et EuCrO.

A la fin de ce mémoire nous fournissons une conclusion qui englobe nos résultats et nous donnons des perspectives à cette recherche.

Références :

- [1] Mrs. Chahrazed Bourouis. These doctorat' Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des semiconducteurs magnétiques dilués (DMS) :Cd1- xFexS' Université 8 Mai 1945 Guelma
- [2] I Zutic, J Fabian, S Das Sarma, Rev. Mod. Phys, **76** (2) (2004) 323
- [3] Mrs. Chahrazed Bourouis. These doctorat' Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des semiconducteurs magnétiques dilués (DMS) :Cd1- xFexS' Université 8 Mai 1945 Guelma
- [4] T, Tang J, Wang K.L.: J. Cryst. Growth. 425, 279-282(2015)
- [5] Rare earth elements: A review of applications, occurrence, exploration, analysis, recycling, and environmental impact
- [6] Eick H. A, Baenziger N. C, & Eyring, L. Lower oxides of samarium and europium. The preparation and crystal structure of SmO_{0.4-0.6}, SmO and EuO. J. Am. Chem. Soc. 78, 5147–5149 (1956)
- [7] R. C, The crystal structure of Eu₃O₄. Acta Crystallogr. 20, 716–723 (1966)
- [8] Yakel H. L, A refinement of the crystal structure of monoclinic europium sesquioxide. Acta Crystallogr. B 35, 564–569 (1979)
- [9] Bommer H. Z. Die Gitterkonstanten der C-Formen der Oxyde der seltenen Erdmetalle Z. Anorg. Allg. Chem. 241, 273–280 (1939)
- [10] Matthias B. T, Bozorth R. M. & Van Vleck, J. H. Ferromagnetic interaction in EuO. Phys. Rev. Lett. 7, 160–161 (1961)
- [11] Schmehl A. et al. Epitaxial integration of the highly spin-polarized ferromagnetic semiconductor EuO with silicon and GaN. Nat. Mater. 6, 882–887 (2007)
- [12] Swartz A. G. et al. Epitaxial EuO thin films on GaAs. Appl. Phys. Lett. 97, 112509 (2010)
- [13] Swartz A. G, Odenthal P. M, Hao Y, Ruoff R. S. & Kawakami R. K. Integration of the ferromagnetic insulator EuO onto graphene. ACS Nano 6, 10063 (2013)
- [14] Melville A. et al. Epitaxial growth of europium monoxide on diamond. Appl. Phys. Lett. 103, 22402 (2013).
- [15] Melville A. et al. Lutetium-doped EuO films grown by molecular-beam epitaxy. Appl. Phys. Lett. 100, 222101 (2012)

- [16] Shannon R. D. & Rossi R. C. Definition of topotaxy. *Nature* 202, 1000–1001 (1964)
- [17] Rossi R. C. & Fulrath R. M. Epitaxial growth of spinel by reaction in the solid state. *J. Am. Ceram. Soc.* 46, 145–149 (1963)
- [18] Mémoire de master 'Généralité sur les lanthanides-Influence de quelques paramètres physico-chimiques sur le rendement de la réaction de synthèse du tribromure de gadolinium. pdf Université A. MIRA –Béjaïa (2016)

The background of the slide is a light cream color, decorated with several black graduation caps (mortarboards) and scattered gold confetti. The caps are positioned at various angles, some appearing to be in motion. The confetti consists of small, curly gold streamers and tiny gold dots, creating a celebratory atmosphere.

Généralité

Généralité

I.1 Généralité sur les semi-conducteurs :

I.1.1 Introduction :

Les semi-conducteurs sont les matériaux utilisés pour la fabrication des dispositifs électroniques et optoélectroniques, parmi les différents types de ces derniers le diamant qui se distingue des autres semi-conducteurs, notamment le silicium et le germanium, par sa capacité à supporter des environnements extrêmes en pression, température et puissance dissipée. La plus grande partie des composants (transistors, diodes et puce en général) sont réalisés en silicium [1].

Les principes fondamentaux de la physique des semi-conducteurs reposent sur la théorie quantique des solides cristallins et sur la statistique de fermi-Dirac. L'étude des propriétés électriques de ces matériaux semi conducteur a révélé l'existence de deux bandes d'énergies caractéristique séparées par un gap ou bande interdite. Ces deux bandes sont définies respectivement pour la plus basse en énergie comme bande de valence BV et bande de conduction BC [2].

I.1.2 Semi-conducteur :

Un semi-conducteur est un isolant pour une température de 0K. Cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant ($\sim 1\text{eV}$), aura de par l'agitation thermique ($T=300\text{K}$), une bande de conduction légèrement peuplée d'électrons et une bande de valence légèrement dépeuplée. Sachant que la conduction est proportionnelle au nombre d'électrons pour une bande d'énergie presque vide et qu'elle est proportionnelle au nombre de trous pour une bande presque pleine, on déduit que la conduction d'un semi-conducteur peut être qualifiée de «mauvaise».

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé, en physique de l'état solide, à l'aide de la théorie des bandes d'énergie. Selon celle-ci, un matériau semi-conducteur possède une bande interdite suffisamment petite pour que des électrons de la bande de valence puissent facilement rejoindre la bande de conduction. Si un potentiel électrique est appliqué à ses bornes, un faible courant électrique apparaît, provoqué à la fois par le déplacement des électrons et par celui des « trous » qu'ils laissent dans la bande de valence.

La conductivité électrique des semi-conducteurs peut être contrôlée par dopage, en introduisant une petite quantité d'impuretés dans le matériau afin de produire un excès d'électrons ou un déficit. Des semi-conducteurs dopés différemment peuvent être mis en contact afin de créer des jonctions, permettant de contrôler la direction et la quantité de

courant qui traverse l'ensemble. Cette propriété est à la base du fonctionnement des composants de l'électronique moderne : diodes, transistors, etc... [3].

I.1.3 Avantage des semi-conducteurs dopés :

Comme les niveaux énergétiques des éléments dopants se situent entre les bandes de valence et de conduction du SC, le nombre des transitions d'électrons est bien plus important que dans les semi-conducteurs intrinsèques. Partant, la conductivité électrique des semi-conducteurs est supérieure à celle des semi-conducteurs intrinsèques. Mais l'énorme avantage du dopage consiste en ce que l'on dispose maintenant de deux types de conducteurs différents, l'un conduisant le courant électrique par « sauts d'électrons » (charges négatives), l'autre par « sauts de trous » (assimilables à des charges positives) [4].

Lorsque nous appliquons une source électrique aux deux types de conducteurs, la migration des porteurs de charges (électrons ou trous) se fait en sens inverse :

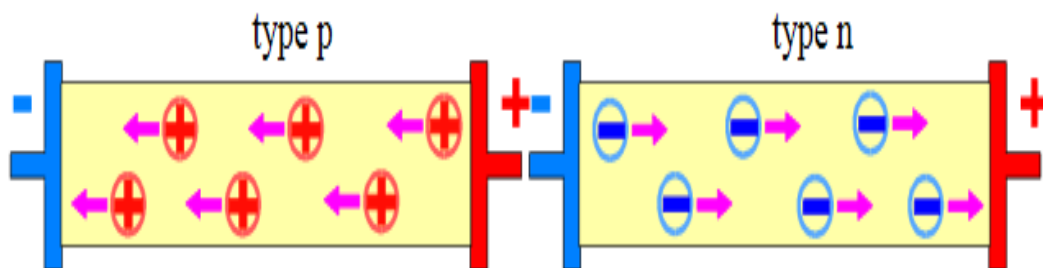


Figure I-1: C'est en effet l'association des 2 types de semi-conducteurs qui permet la réalisation des deux applications qui sont à la base de l'électronique moderne : la diode et le transistor.

I.1.4 Les oxydes de semi-conducteurs :

Les oxydes semi-conducteurs (ZnO, CdO...) sont parmi les matériaux les plus étudiés et les plus d'actualité dans la science contemporaine de la matière condensée, l'intérêt étant motivé à la fois par les défis fondamentaux posés par leurs structures et propriétés électroniques et magnétiques, plus et par le large éventail d'applications, y compris celles de la catalyse et des dispositifs électroniques. Cette section spéciale vise à mettre en évidence les développements récents de la physique de ces matériaux et à montrer le lien entre le développement de la compréhension fondamentale et les domaines d'application clés des semi-conducteurs à oxyde [5]. Parmi les matériaux très utilisables on à :

L'oxyde de zinc (ZnO) qu'il est un semi-conducteur de type n bien connu avec une bande interdite directe de $\sim 3,3$ eV. Il a une énergie de liaison passionnante de 60 mV et peut être utilisé dans des appareils ultraviolets, des photo-catalyseurs, des cellules photovoltaïques et le stockage de données [6]. Et l'oxyde de cadmium (CdO) est un semi-conducteur de type n avec une bande interdite directe de 2,2 à 2,5 eV. Il présente des propriétés intéressantes pour les applications optoélectroniques, une faible résistivité électrique et une transmittance optique élevée dans la région visible du spectre solaire. Sa bande interdite modérée le rend utile pour une large gamme d'applications telles que photodiodes et cellules solaires [7].

I.1.5 Les semi-conducteurs à base de terre rare :

Les terres rares sont composées d'une série d'éléments regroupés en marge du tableau de Mendeleïev [8].

Le **tableau I.1** montre la partie du tableau périodique concernant les éléments lanthanides. Il y a 15 éléments, mais Pm est un élément instable et il est exclu. Les lanthanides sont appelés « terres rares » [9].

La ⁵⁷	Ce ⁵⁸	Pr ⁵⁹	Nd ⁶⁰	Sm ⁶²	Eu ⁶³	Gd ⁶⁴	Tb ⁶⁵	Dy ⁶⁶	Ho ⁶⁷	Er ⁶⁸	Tm ⁶⁹	Yb ⁷⁰	Lu ⁷¹
------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------	------------------

Tableau I-1. Les éléments lanthanides.

Lorsqu'ils sont utilisés comme ions dopants, les ions terres rares se présentent le plus souvent sous une forme divalente ou trivalente. A partir de ce moment, de nombreuses matrices dopées par des ions de terre rare ont permis d'obtenir un effet laser. Parmi celles-ci, c'est certainement le YAG :Nd³⁺(Y₂Al₅O₁₂ :Nd³⁺), en particulier pour les applications de forte puissance, qui a été le plus exploité. L'ion Er³⁺ a connu et connaît encore lui-aussi un très grand succès dans le domaine des télécommunications avec le développement d'amplificateurs et de lasers à fibre optique du fait de la présence d'une transition à 1.54 μ m correspondant à la fenêtre spectrale où l'absorption est minimale dans les fibres optiques classiques. Enfin, plus récemment, c'est l'ion Yb³⁺ qui semble le plus largement étudié. Il représente en effet une bonne alternative à l'ion Nd³⁺ pour les lasers à forte puissance pompés par diodes lasers à semi-conducteurs, en raison de meilleurs rendements.

La recherche dans le domaine des phosphores pour les écrans à tube cathodique a entraîné de nombreuses études dès les années 50 sur les semi-conducteurs II-VI dopés par des ions de terres rares.

Dans les années 70, le développement des écrans électroluminescents multicolores liés au domaine de l'affichage a ensuite contribué à maintenir une activité de recherche très forte dans ce domaine. En effet, les nombreuses transitions permises par l'ensemble des terres rares permettaient de penser que la réalisation de dispositifs électroluminescents dans un grand domaine de longueurs d'onde allant de l'ultraviolet au proche infrarouge était possible [8].

I.2 Les composantes de nos matériaux :

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

Le tableau périodique des éléments est classé par groupes et périodes. Les légendes indiquent les catégories suivantes :

- Non-métaux (gris)
- Métaux alcalins (orange)
- Métaux alcalino-terreux (jaune)
- Métaux de transitions (bleu foncé)
- Métaux pauvres (bleu clair)
- Métalloïdes (vert)
- Halogènes (bleu clair)
- Gaz nobles (bleu foncé)
- Lanthanide (orange)
- Actinide (orange)

Les éléments suivants sont surlignés dans le tableau :

- Oxygène (O, numéro atomique 8)
- Chrome (Cr, numéro atomique 24)
- Europium (Eu, numéro atomique 63)

Figure I-2 : Le tableau périodique des éléments.

a) Europium :

L'**europium** est un élément chimique [10], de symbole **Eu** et de numéro atomique 63. Il est le plus réactif des éléments des terres rares [11]. Il ne se trouve pas dans la nature en tant qu'élément libre. L'oxyde d'europium est une source d'europium thermiquement stable hautement insoluble adaptée aux applications de verre, d'optique et de céramique. L'oxyde d'europium a une structure cubique similaire à celle de l'oxyde de manganèse et peut être formé par inflammation de l'europium métallique [12].

Nom	Europium
Symbole	Eu
Numéro	63
Série chimique	Lanthanides
Groupe, Période, Bloc	L/A, 6, f
Masse volumique	5,244 g·cm ⁻³

Tableau I-2 : Information Générales de L'euporium

Masse atomique	151.96 g mol ⁻¹
Rayon atomique	185 pm (247 pm)
Rayon de covalence	1,98 ± 0,06 Å
Configuration électronique	[Xe] 4f ⁷ 6s ²
Électrons par niveau d'énergie	2, 8, 18, 25, 8, 2
Structure cristalline	Cubique centré

Tableau I-3 : Propriétés atomiques de L'euporium

b) L'oxygène :

L'**oxygène** est un Élément chimique gazeux [13] de numéro atomique 8, de symbole **O**. C'est la tête de file du groupe des chalcogènes, souvent appelé groupe de l'oxygène.

Nom	Oxygène
Symbole	O
Numéro Atomique	8
Groupe/Période/Bloc	16/2/p
Famille d'élément	Non-métal
Configuration électronique	[He] 2s ² 2p ⁴
Electron par niveau d'énergie	2, 6

Tableau I-4 : Information Générales de L'oxygène

Masse atomique	15.999 g mol⁻¹
Rayon atomique	60 pm (48 pm)
Rayon de covalence	66 ± 2 pm ²
Configuration électronique	[He] 2s ² 2p ⁴
Électrons par niveau d'énergie	2, 6
Structure cristalline	Cubique

Tableau I-5 : Propriétés atomiques de L'oxygène

c) **Chrome** :

Le **chrome** est l'élément chimique de numéro atomique 24, de symbole **Cr**. Le corps simple est un métal de transition [14].

Masse atomique	51,996 g mol⁻¹
Rayon atomique	140 pm (166 pm)
Rayon de covalence	139 ± 5 pm ²
Etat d'oxydation	6, 3, 2
Electronégativité	1,66

Tableau I-6 : Information Générales de Chrome

Nom	Chrome
Symbole	Cr
Numéro Atomique	24
Groupe/Période/Bloc	6/4/d
Famille d'élément	Métal de transition
Configuration électronique	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹
Electron par niveau d'énergie	2, 8, 13, 1

Tableau I-7 : Propriétés atomiques de Chrome

I.3 Monoxyde d'Europium (EuO) :

Le composé de terres rares (RE) a attiré beaucoup d'attention en raison de leurs remarquables propriétés semi-conductrices et ferromagnétiques (FM) [15,16] et des propriétés électroniques complexes liées aux électrons hautement corrélés. Les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) ont également été étudiés de manière approfondie en raison de leurs futures applications [17–27]. L'oxyde d'europium (EuO) est l'un d'entre eux, en raison de sa bande interdite directe (1,1 eV) à température ambiante [28].

I.3.1 caractérisation :

Les propriétés optiques des ions de terres rares (également connus sous le nom de lanthanides) piégés dans les réseaux hôtes continuent d'être un attrait pour la recherche en termes à la fois de leur importance fondamentale et technologique. [29,30] La combinaison des propriétés optiques prometteuses des ions de terres rares et des nanoparticules sous forme de revêtements ou de couches minces est importante dans la fabrication de dispositifs optiques tels que des amplificateurs optiques et des micro-lasers ayant une dimension submi-cron [31].

Pour obtenir l'oxyde d'europium il faut passer par des étapes qui est comme suit :

Le rasage en couche mince EuO a été obtenu par évaporation réactive d'europium métallique de qualité commerciale dans une chambre à vide où la pression partielle d'oxygène est maintenue lors de l'évaporation à environ $3 \times 10^{-5} \sim$ torr. Le creuset est en oxyde de béryllium avec un couvercle en tantale percé d'un trou de 1 mm. Le substrat est composé de verre et de deux électrodes en aluminium d'espace de 1 mm ont été déposés avant l'évaporation de l'europium. La température du substrat est maintenue à 400 ° C pendant la condensation d'EuO. Immédiatement après l'obtention du film EuO, une couche protectrice de fluorure de magnésium est évaporée d'un creuset séparé après le fond de terre la pression a rapidement chuté en dessous de $10^{-6} \sim$ tores et le chauffage du substrat s'est arrêté. Un taux typique de condensation pour EuO est de 25 Å / s [32].

I.3.2 Propriétés :

L'oxyde d'europium est également étudié dans les structures rock-salt, CsCl et ZB, Ces structures contiennent deux atomes par maille élémentaire comme indiqué sur la **figure (1-8)** avec des paramètres de réseau de 5,144 Å, qui est réduit à 5,127 Å en dessous de 10 K [33], ce composé est également ferromagnétique [30]. Il y a une forte corrélation entre les interactions électroniques et magnétiques dans **EuO** conduisant à de meilleures propriétés physiques. Par exemple, le décalage de la bande interdite optique et les changements de structure de bande électronique sont liés à l'ordre ferromagnétique [35–37].

De plus, c'est le seul matériau qui présente de l'oxyde de ferromagnétique ($T_c = 69 \text{ K}$) [15,38] dont la stabilité thermodynamique est prédite avec le silicium [39] en raison du mécanisme de sauts 4f-5d [40]. De plus, les propriétés remarquables de masse d'EuO par exemple, une transition métal-isolant avec un changement de résistivité d'environ 15 ordres de grandeur, une magnéto-résistivité d'environ 6 ordres de grandeur dans 2 T , une bande de conduction polarisée en spin à 100% [41–44] et des effets magnéto-optiques très forts, etc. D'autre part, les propriétés magnétiques d'EuO peuvent être obtenues par déformation [45], pompage optique [46] ou dopage [47,48].

Ces propriétés remarquables ont montré que l'EuO est un matériau candidat important dans de nombreux dispositifs de spintronique avec de larges applications telles que le filtrage par centrifugation [42,49–51].

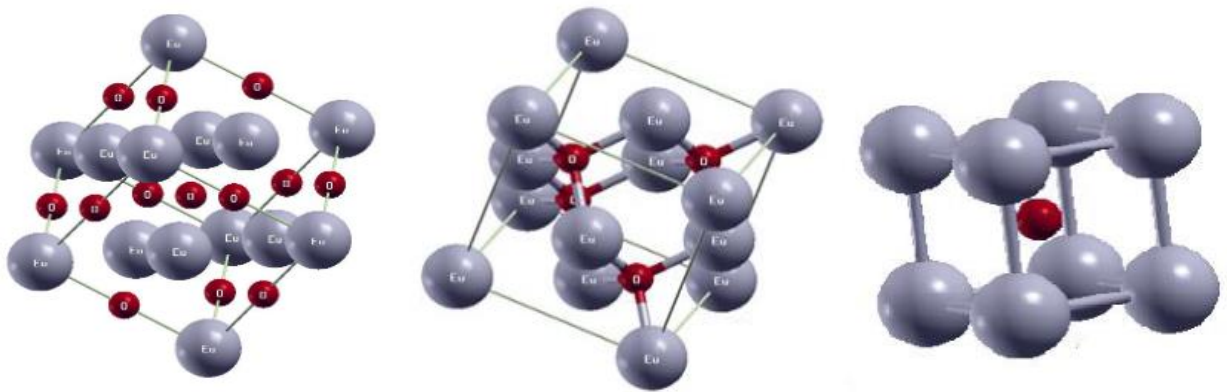


Figure I-3: L'illustration schématique des phases de NaCl , de ZB et de CsCl de EuO.

I.4 Les Semi conducteurs magnétiques :

I.4.1 L'électronique de spin :

La spintronique est une branche de l'électronique qui exploite non seulement la charge, mais aussi le spin des électrons. Elle est notamment à l'origine des avancées technologiques les plus récentes.

Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott [52] en 1936, a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60 [53, 54].

I.4.2 La magnétorésistance géante (GMR) :

Le découvert de la GMR était en 1988 par deux équipes indépendantes, celle d'Albert Fert et de Peter Grünberg [55].

L'effet de magnétorésistance géante (GMR) est réellement le point de départ de la spintronique. Cet effet était observé dans une structure composée des multicouches ferromagnétiques et non-magnétiques [56]. Les premières observations de la magnétorésistance géante ont été réalisées dans des multicouches Fe/Cr où, pour de faibles épaisseurs de chrome, il existe un couplage antiferromagnétique entre les couches de fer. En l'absence de champ magnétique appliqué, sous l'effet du couplage, les aimantations des couches de fer successives sont antiparallèles. À fort champ les aimantations sont parallèles et la résistivité mesurée en injectant un courant dans le plan des couches. (**Figure 4-1**)

Le 9 octobre 2007, Albert Fert et Peter Grünberg ont reçu conjointement le Prix Nobel de physique pour leur découverte de la magnétorésistance géante.

Afin d'illustrer le principe de fonctionnement de l'effet GMR, on considère deux configurations caractérisées par un empilement de deux couches ferromagnétiques à magnétisation parallèle (**fig4-2.a**) et antiparallèle (**fig4-2.b**) séparées par une couche conductrice non-magnétique [57]. Les électrons qui participent à la conduction électrique peuvent avoir un spin parallèle (majoritaire \uparrow) ou opposé (minoritaire \downarrow) par rapport à l'aimantation des couches. Les trajectoires des électrons sont déterminées par leur spin car les phénomènes de diffusion sont forts dans le cas d'un spin opposé à la magnétisation et plus faible dans le cas contraire. Dans la configuration avec des couches à magnétisation parallèle les électrons de spin majoritaire (up) passent à travers la structure presque sans diffusion (flèche verte), tandis que les électrons de spin minoritaire (down) sont plus fortement diffusés (flèche rouge). Dans la configuration antiparallèle, les électrons sont tous diffusés et donc la résistance de la structure est plus élevée.

Dans le cas d'absence de champ magnétique extérieur, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques successives sont opposés et la résistance est maximale alors qu'en présence d'un champ magnétique, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques s'alignent progressivement dans l'axe du champ magnétique appliqué et la résistance électrique de la structure diminue.

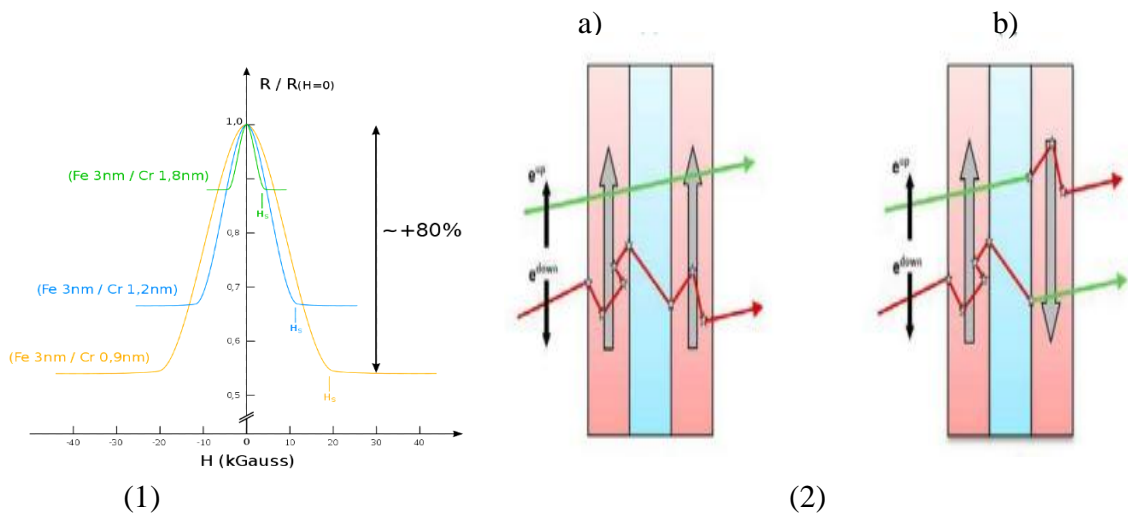


Figure I-4: 1) reproduction des résultats de Albert et Fert montrant une magnétorésistance qui s'élève à plus que 80%

2) Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante. **(a)** Magnétisation parallèle et **(b)** Magnétisation antiparallèle.

I.4.3 La magnétorésistance tunnel (TMR) :

La TMR, très proche de la GMR, s'appuie sur le Modèle de Jullière [58] qui utilise la différence de densité d'état électronique en fonction du spin pour les matériaux ferromagnétiques. On considère que lors d'une transition tunnel, l'électron qui a traversé la barrière tunnel ne change pas de spin. Pour obtenir une TMR, on réalise un empilement de deux couches ferromagnétiques séparées cette fois par une couche très mince (de l'ordre du nanomètre) d'isolant, jouant le rôle de barrière tunnel pour les électrons.

– Dans la configuration parallèle : les électrons up et down au niveau de Fermi vont trouver la même densité d'états de l'autre côté de la barrière tunnel. Le courant tunnel est donc important.

– Dans la configuration antiparallèle : les électrons up vont trouver une densité plus importante alors que les électrons down vont en trouver une plus faible. Il en résulte un courant tunnel plus faible.

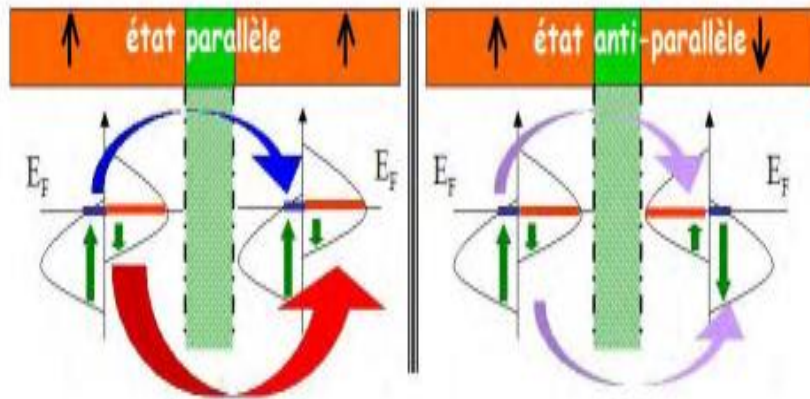


Figure I-5 : schéma représentatif du fonctionnement d'une jonction magnétorésistive par effet tunnel (TMR), [59].

I.5 Semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) :

Les semi-conducteurs magnétiques dilués (Diluted magnetic semiconductor : DMS) sont des matériaux semi-conducteurs traditionnels de type IV (Si, Ge...), III-V (AlX, GaX, NX..... X= N, P, As....) ou II-VI (CdX, ZnX, MgX..... X= S, Se, Te....) dopés par des ions magnétiques possédant une couche 3d ou une couche 4f partiellement remplies [60].

I.5.1 Mécanismes d'interactions d'échange dans le DMS:

On peut considérer les semi-conducteurs semi-magnétiques comme deux système électroniques, dont un contient les électrons des bandes de valence ou de conduction et l'autre contient les électrons localisés sur les impuretés magnétiques avec un moment magnétique bien défini.

Dans ce cas, nous nous intéressons non seulement aux interactions entre les ions magnétiques mais aussi aux interactions entre les ions magnétiques et les porteurs délocalisés (porteurs de charge libre) [61].

a) Echange direct :

Ce mécanisme se manifeste entre les ions magnétiques les plus proches voisins, quand il y a un chevauchement direct entre les fonctions d'ondes.

L'interaction d'échange entre ces ions provient de l'interaction de Coulomb entre électrons. Les électrons à spins parallèles sont maintenus séparés en raison du principe d'exclusion de Pauli, ce qui conduit à une diminution de la répulsion coulombienne.

L'échange direct est une interaction à courte portée. Si la distance interatomique est trop grande (c'est-à-dire que le chevauchement de la fonction d'onde est trop faible), le couplage d'échange direct n'est pas suffisamment fort.

b) Super-échange :

Ce mécanisme se diffère du mécanisme d'échange direct par l'existence d'un ion non magnétique entre les deux ions magnétiques voisins qui interagissent par chevauchement de la fonction d'onde avec cet ion non magnétique intermédiaire.

il est le plus important dans les solides ioniques tels que les oxydes de métaux de transition et les fluorures [62] puisque les ions magnétiques sont toujours séparés par des anions non magnétiques rendant ainsi, l'interaction d'échange direct très faible. Il y a un recouvrement entre l'orbitale d des cations magnétiques et l'orbitale p d'un anion non magnétique (oxygène O^{2-}) pris en sandwich entre deux cations magnétiques.

c) Echange indirect :

L'interaction d'échange entre les ions magnétiques est médiée par les porteurs de charge libres.

L'interaction de double échange et l'interaction RKKY sont deux types d'échange indirect.

d) Double échange :

Une forte corrélation entre le caractère métallique et ferromagnétique a été observé par Jonker et van Santen [63,64] dans les manganites substitués, $La_{1-x}D_xMnO_3$, où D est un cation alcalino-terreux divalent, et pour expliquer ceci Zener [65,66] a proposé un mécanisme nommé le « double échange », qui fait intervenir les ions oxygène pour assurer le transport des électrons entre les cations de manganèse de charges $3+$ et $4+$ qui sont séparés par une grande distance pour lesquels l'échange direct (cation-cation) est nul.

Comme il est illustré sur la Figure :

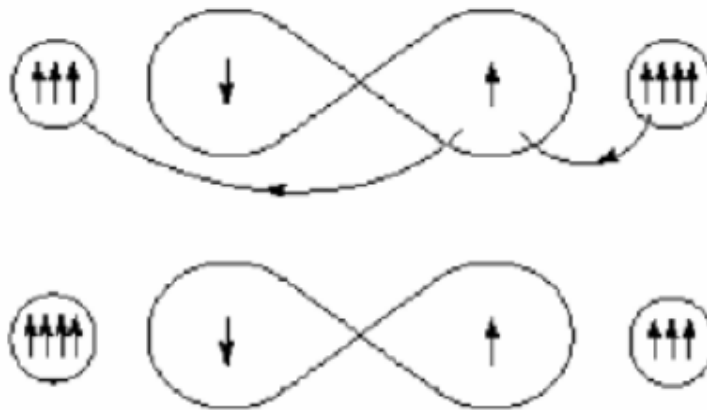


Figure I-6: Double échange. Cas de deux ions Mn^{4+} et Mn^{3+} séparés par un ion oxygène. Au même moment où un électron de l'ion Mn^{4+} saute vers l'oxygène, celui-ci un électron vers l'autre ion Mn. Ceci n'est possible que si les deux ions de Mn ont leurs spins parallèles.

e) RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida):

L'interaction RKKY est une interaction d'échange entre les moments localisés; elle est réalisée par l'intermédiaire des porteurs libres dans le matériau.

Ce mécanisme a d'abord été proposé par Ruderman et Kittel [67] pour expliquer le ferromagnétisme dans les terres rares où il y a une interaction entre les moments localisés sur les orbitales 4f et les électrons de conduction; plus tard il a été reformulé par Kasuya et Yoshida [68-70].

le mécanisme RKKY a été utilisé pour expliquer le couplage entre les multicouches ferromagnétiques et non-magnétiques constituant la GMR où, les électrons de conduction de la couche NM acquièrent une faible polarisation au contact des couches magnétiques et les directions de l'aimantation des couches F1 et F2 sont couplées par l'intermédiaire de ces électrons en fonction de l'épaisseur de la couche NM. Après l'oscillation à travers la couche non magnétique, si les deux interfaces F1/NM et NM/F2 présentent la même polarisation, le couplage sera positif et favorisera l'alignement parallèle des moments magnétiques; si les deux interfaces ne présentent pas la même polarisation, alors le couplage sera négatif et les moments magnétiques vont s'aligner antiparallèlement [71].

Dans ce modèle, le signe du couplage J dépend de la distance entre deux ions magnétiques, ferromagnétique et antiferromagnétique (**Figure I-7**)

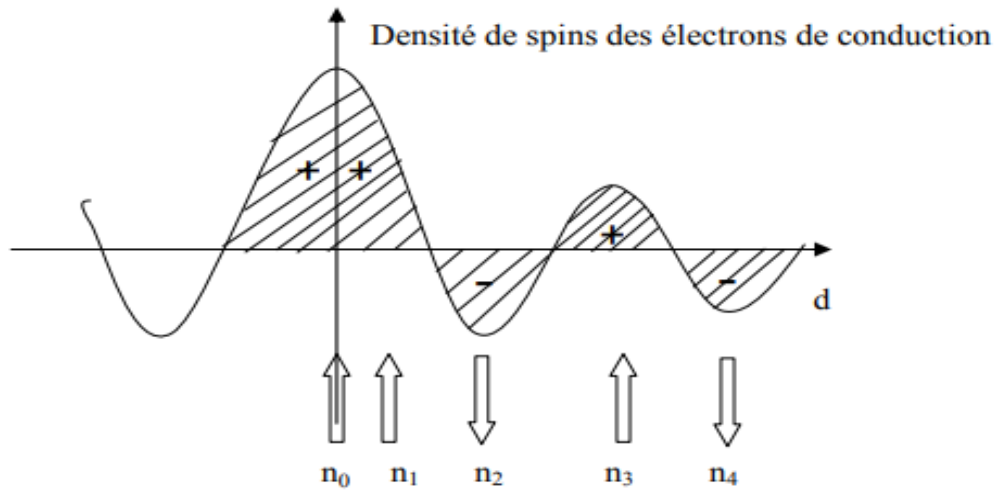


Figure I-7 : Schéma de l'interaction d'échange indirect RKKY isotrope.

(+) et (-) représentent la polarisation des électrons de conduction en fonction de l'éloignement d de l'ion magnétique situé en site n_0 .

↑ et ↓: l'orientation de moments magnétiques.

f) Interaction d'échange s-d et p-d :

Cette interaction d'échange se manifeste entre les porteurs délocalisés appartenant aux orbitales s et p de la matrice semi-conductrice et les électrons localisés sur des ions magnétiques. Dans les DMS, les orbitales s des cations et p des anions forment les bandes de conduction et de valence respectivement.

L'Hamiltonien d'échange est donné par:

$$H_{ech} = \sum_i J(r - R_i) S_i S \tag{I.1}$$

Où :

J : Représente l'intégrale d'échange entre les porteurs localisés et délocalisés.

S_i : est le spin des électrons localisés en R_i appartenant aux ions magnétiques.

S : est le spin des porteurs délocalisés en r appartenant à la matrice semi-conductrice.

Avec l'approximation du cristal virtuel et l'approximation du champ moyen, l'Hamiltonien d'échange peut prendre deux formes :

- Pour les électrons de la bande de conduction de symétrie s et ceux localisés sur l'ion magnétique:

$$H_{ech} = -x N_0 \alpha \langle S \rangle \tag{I.2}$$

- Pour les électrons de la bande de valence de symétrie p et ceux localisés sur l'ion magnétique :

$$H_{ech} = -x N_0 \beta \langle S \rangle \quad \text{I.3}$$

$N_0 \alpha$ et $N_0 \beta$ sont les constantes d'échange correspondant aux interactions d'échanges $s-d$ et $p-d$ respectivement.

Si la constante d'échange est positive, l'interaction est ferromagnétique et si elle négative l'interaction est antiferromagnétique. D'après la littérature, $N_0 \beta$ est plus élevée (en valeur absolue) que $N_0 \alpha$.

I.6 Les semi-conducteurs Demi-métalliques ferromagnétiques :

Le concept de demi-métallique ferromagnétique a été introduit par de Groot et al [72]. ils ont attiré intérêt croissant en raison de leur polarisation parfaite en spin structure de bande, puisqu'ils sont censés être utilisés comme matériaux potentiels pour les applications de dispositifs spintroniques, comme une source de porteurs polarisés en spin injectant dans semi-conducteurs et une électrode de tunnel magnétique jonctions [73].

Récemment, un nouveau ferromagnétique semi-métallique compatible avec les semi-conducteurs III – V, zinc-blende CrAs, a été conçu théoriquement sur la base des premiers principes de calculs de structure de bande électronique [74-75].

I.7 L'objectif de notre étude :

Parmi tous les monoxydes métalliques, le monoxyde d'euporium (EuO) est un semi-conducteur ferromagnétique unique. Une température de Curie (T_c) de la masse EuO est d'environ 70 K, et une transition métal-isolant apparaît autour de T_c [76].

Il a été rapporté que la température T_c et TMI augmente pour les films EuO déficitaires en oxygène [77].

Notre but est d'étudier la structure électronique et les propriétés magnétiques de substitution d'EuO dopé par un élément de transition, et de calculer les paramètres structuraux tels que les constantes des réseaux (a), les modules de compressibilités...

Références :

- [1] Jérôme faist «introduction a la physique des semi-conducteurs» université de neuch atelneuchatel, mai 2001
- [2] Zarki Abd Erazzek «transport dans les semi-conducteurs» thèse de master université larbi Ben m'hidi (OumELBouaghi) 2011
- [3] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Semi-conducteur#Description>
- [4] Noël SERVAGENT, physique des semi-conducteurs: fondamentaux capteurs à semi-conducteurs et application, Ecole des Mines de Nates
- [5] Richard Catlow and Aron Walsh 2011 J. Phys. Condens. Matter 23 330301
- [6] Yousef A, Barakat Nasser AM, Amna T, Unnithan AR, Al-DeyabSS, Kim HY (2012) Influence of CdO-doping on the photo-luminescence properties of ZnO nanofibers: effective visible light photocatalyst for waste water treatment. J Lumin 132:1668–1677
- [7] Mosquera E, Pozo I, Morel M (2013) Structure and red shift of optical band gap in CdO–ZnO nanocomposite synthesized by the sol gel method. J Solid State Chem 206:265–271
- [8] Mr. Loïc Bodiou. These doctorat 'Etude des mécanismes d'excitation et d'émission de couches minces de GaN dopées Eu^{3+} , Er^{3+} et Tm^{3+} pour nouveaux dispositifs électroluminescents Université de caen/basse-normandie u.f.r des sciences
- [9] T Gougousi, M Jason Kelly, David B Terry, and Gregory N Parsons, JAppl. Phys, Vol. 93(3).2003
- [10] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Europium>
- [11] <https://www.techno-science.net/glossaire-definition/Europium.html>
- [12] <https://www.americanelements.com/europium-oxide-1308-96-9>
- [13] <https://www.lenntech.fr/data-perio/o.htm>
- [14] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Chrome>
- [15] B.T Matthias, R.M Bozorth, J.H Van Vleck, Phys. Rev. Lett. 7 (1961) 160
- [16] A Mauger, C Godart, Phys. Rep. 141 (1986) 51
- [17] A Svane, O Gunnarsson, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 1148
- [18] Z Szotek, W.M Temmerman, H Winter, Phys. Rev. B. 47 (1993) 4029
- [19] W.M Temmerman, H Winter, Z Szotek, A Svane, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 2435

- [20] D Kodderitzsch, W Hergert, W.M Temmerman, Z Szotek, A Ernst, H Winter, Phys. Rev. B 66 (2002) 064434
- [21] D Kodderitzsch, W Hergert, Z Szotek, W.M Temmerman, Phys. Rev. B 68 (2003)125114
- [22] Z Szotek, W.M Temmerman, H Winter, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 1244
- [23] S.V Beiden, W.M Temmerman, Z Szotek, G.A Gehring, Phys. Rev. Lett. 79 (1997)3970
- [24] P Strange, A Svane, W.M Temmerman, Z Szotek, H Winter, Nature 399 (1999)756
- [25] L Petit, A Svane, Z Szotek, W.M Temmerman, Science 301 (2003) 498
- [26] M Luders, A Ernst, M Dane, Z Szotek, A Svane, D Kodderitzsch, W Hergert, B.L. Gyorffy, W.M Temmerman, Phys. Rev. B. 71 (2005) 205109
- [27] I.D Hughes, M Dane, A Ernst, W Hergert, M Luders, J Poulter, J.B Staunton, A Svane, Z Szotek, W.M Temmerman, Nature 446 (2007) 650
- [28] C Caspers, A Gloskovskii, M Gorgoi, C Besson, M Luysberg, K.Z Rushchanskii, M Ležaić, C.S Fadley, W Drube, M Müller, Sci. Rep. 6 (2016) 22912
- [29] Reisfeld, R Jorgensen, C K. Lasers and excited states of rare earths; Springer-Verlag: New York, 1977
- [30] Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths; Reisfeld, R, Jorgensen, C. K, Gschneider, K. A, Jr, Eyring, L, Eds.; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 1987
- [31] Polman, A.J. Appl. Phys. 1997, 82, 1
- [32] C. Llinares, E. Monteil and G. Bordure: Transport properties of europium oxide thin films. Vol. 9, pp. 1871—1876, 1971
- [33] F Levy, Physik Kondens, Materie 10 (1969) 71
- [34] V Eyert, W Nolting, Solid State Commun. 60 (1986) 905
- [35] P.M Grant, J.C Suits, Appl. Phys. Lett. 14 (1969) 172
- [36] G. Busch, F. Levy, 27, (1968), 37
- [37] G Guntherodt, P Wachter, Helv. Phys. Acta 45 (1972) 886
- [38] T.R McGuire, M.W Shafer, J Appl. Phys. 35 (1964) 984
- [39] K.J Hubbard, D.G Schlom, J Mater. Res. 11 (1996) 2757
- [40] T Kasuya, IBM J Res. Dev. 14 (1970) 214

- [41] P.G Steeneken, L.H Tjeng, I Elfimov, G.A Sawatzky, G Ghiringhelli, N.B Brookes, D.J Huang, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 047201
- [42] T.S Santos, J.S Moodera, Phys. Rev. B 69 (2004) 241203
- [43] A Schmehl, V Vaithyanathan, A Herrnberger, S Thiel, C Richter, M Liberati, T Heeg, M Reockerath, L.F Kourkoutis, S Muhlbauer, P Beoni, D.A Muller, Y Barash, J Schubert, Y Idzerda, J Mannhart, D.G Schlom, Nat. Mater. 6 (2007)882
- [44] A Melville, T Mairoser, A Schmehl, D.E Shai, E.J Monkman, J.W Harter, T Heeg, B Holleander, J Schubert, K.M Shen, J Mannhart, D.G Schlom, Appl.Phys. Lett. 100 (2012) 222101
- [45] N.J.C Ingle, I.S Elfimov, Phys. Rev. B 77 (2008) 121202.
- [46] M Matsubara, A Schroer, A Schmehl, A Melville, C Becher, M Trujillo-Martinez, D.G. Schlom, J Mannhart, J Kroha, M Fiebig, Nat. Comm. 6 (2015) 6724
- [47] T Mairoser, F Loder, A Melville, D.G Schlom, A Schmehl, Phys. Rev. B 87 (2013)014416
- [48] N Jutong, U Eckern, Th Mairoser, U Schwingenschlögl, Sci. Rep. 5 (2015) 8038
- [49] C Caspers, M Mueller, A.X Gray, A.M Kaiser, A Gloskovskii, C.S Fadley, W Drube, C.M Schneider, Phys. Status Solidi-Rapid Res. Lett. 5 (2011) 441
- [50] M Mueller, G.-X Miao, J.S Moodera, EPL 8 (2009) 47006.
- [51] P V Lukashev, A.L Wysocki, J.P Velez, M van Schilfgaarde, S.S Jaswal, K.D Belashchenko, E.Y Tsymbal, Phys. Rev. B 85 (2012) 224414
- [52] N F Mott, Proc. Roy. Soc.A 153(1936) 699
- [53] A Fert et I A Campbell, Phys. Rev. Lett.21(1968) 1190, J. Physique32(1971) C1-46, J. Phys. F6 (1976) 849
- [54] B Loegel et F Gautier, J. Phys. Chem.Sol.32(1971) 2723
- [55] https://fr.wikipedia.org/wiki/Magnsistance_géante#Découverte
- [56] Mr. YUE Zhang.These doctorat' modélisation compacte et conception de circuit hybride pour les dispositifs spintroniques basés sur la commutation induite par le courant' Univ. Paris-Sud/CNRS UMR 8622
- [57] Maria marins de castro suza, "Commutation précessionnelle de mémoire magnétique avec polariseur à anisotropie perpendiculaire", Thèse de doctorat,

- Université de Grenoble (2011)
- [58] Jullière, M Physical Letters 54A, 225 (1975)
- [59] Respaud M, Carrey J, Cours de Nanomagnétisme et Spintronique, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, (2009)
- [60] Ms. Mohammed Hadi Gous. These doctorat'Calcul des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués à base de MgS et des alliages demi-heusler demi-métalliques CoVTe et RuVTe' Université 8 mai 1945-Guelma
- [61] Ms. Rakrak Kaddour. Le diplôme de magister' Etude des composants piezo-spintroniques a base de nanostructures semi magnétiques de ZnO/Zn_{1-x}Mn_xO Université d'Oran(2009)
- [62] Rogl G, Grytsiv A, Gürth M, Tavassoli A, Ebner C, Wünschek A & Müller H. (2016). Mechanical properties of half-Heusler alloys. Acta Materialia, 107, 178-195
- [63] M Oshikiri, F Aryasetiawan, J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 2123.
- [64] A Mang, K Reimann, S Rubenacke, Solid State Commun. 94 (1995) 251.
- [65] S Massidda, R resta, M Posternak, A Baldereschi, Phys. Rev. B 52 (1995) R16977
- [66] Y. N Xu, W.Y Ching, Phys. Rev. B 48 (1993) 4335
- [67] Haury A, Wasiela A, Arnoult A, Cibert J, Tatarenko S, Dietl T, & d'Aubigné Y. M. (1997). Observation of a ferromagnetic transition induced by two-dimensional hole gas in modulation-doped CdMnTe quantum wells. Physical Review Letters, 79(3), 511
- [68] Ruderman M. A, & Kittel C. (1954). Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. Physical Review, 96(1), 99
- [69] Kasuya T. (1956). A theory of metallic ferro-and antiferromagnetism on Zener's model. Progress of theoretical physics, 16(1), 45-57
- [70] Yosida K. (1957). Magnetic properties of Cu-Mn alloys. Physical Review, 106(5), 893
- [71] Tuzcuoglu H. (2014). Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co₂FeAl (Thèse de doctorat, Paris 13)
- [72] R. A de Groot et al, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 2024

- [73]** S.A Wolf, D.D Awschalom, R.A Buhrman, J.M Daughton, S von Molnar, M.L Roukes, A.Y Chtchelkanova, D.M Treger, Science 294 (2001) 1488
- [74]** H Akinaga, T Magano, M Shirai, Jpn J. Appl. Phys. 39 (2000) L1118
- [75]** M Shirai, Physica E 10 (2001) 143. [4] M. Mizuguchi, K. Ono, M. Oshima
- [76]** M. R Oliver, J. O Dimmock, A. L McWhorter, and T. B Reed, Phys.Rev.5,78-1
- [77]** O Massenet, Y Capiomont, and Nguyen Van Dang, J Appl. Phys.45,3593-1974

The background of the slide is white and decorated with several black graduation caps (mortarboards) and golden streamers or confetti scattered across the surface. The caps are positioned at various angles, some appearing to be in motion. The streamers are thin, wavy lines of gold. The overall theme is celebratory and academic.

Méthode de calcul

Méthode de calcul

Introduction :

Pour une étude théorique complète et satisfaisante des solides, un traitement mécanique quantique est indispensable. Cela revient à formuler et à résoudre l'équation de Schrödinger à plusieurs corps pour les nucléons et électrons constituant le solide. Afin de simplifier ce problème complexe, on peut considérer les nucléons comme statiques dans un premier temps et ne traitant que les électrons. Si nécessaire, l'effet des degrés de liberté nucléaires peut être considéré dans une seconde étape. Cette simplification est connue sous le nom d'approximation de Born-Oppenheimer et justifiée par le fait que l'échelle de temps caractéristique du mouvement nucléaire est beaucoup plus longue que son homologue électronique. Par conséquent, nous nous retrouvons avec l'équation électronique de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i - \frac{1}{2} \sum_k \frac{\Delta_k}{M_K} + \sum_i \sum_j \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k Z_l}{|R_k - R_l|} + \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k}{|r_i - R_k|} \right] \psi(r_1, \dots, r_N) = E \psi(r_1, \dots, r_N) \quad \text{II.1}$$

pour N électrons avec des vecteurs de position r_i , où nous désignons le nombre de nucléons par M et leur charge et leur position par Z_μ et R_i , respectivement. Malheureusement, la solution directe de cette équation n'est possible que pour de petites valeurs de N car la dimension de l'espace de Hilbert de (r_1, \dots, r_N) croît comme V^N avec la taille du système V et le nombre N d'électrons. Très souvent $V \propto N$ et la dimension de l'espace de Hilbert croît comme N^N

II.1 Théorie fonctionnelle de la densité :

La théorie fonctionnelle de la densité a été développée par Hohenberg et Kohn [1] et Kohn et Sham [2]. Il évite l'augmentation dramatique de l'espace de Hilbert avec la taille du système en remplaçant la fonction d'onde complexe à plusieurs corps (r_1, \dots, r_N) par la densité de charge plus simple comme objet de base de la théorie.

II.1.1 Equation de Schrödinger :

Afin d'étudier théoriquement les propriétés d'un matériau solide composé d'un grand nombre de noyaux et d'électrons (M : noyaux et N : électrons) en interaction, l'équation de Schrödinger mentionnée ci-dessous (éq II. 1) devrait être résolue.

$$H\Psi = E\Psi \quad \text{II.2}$$

Dans cette équation, E est l'énergie totale du système, H est l'hamiltonien et Ψ est la fonction d'onde.

L'Hamiltonien se décompose en deux contributions, T et V sont les opérateurs associés à l'énergie cinétique et l'énergie potentielle, respectivement :

$$H = T + V \quad \text{II.3}$$

La partie cinétique est constituée de deux termes, T_{el} pour les électrons et T_{noy} pour les noyaux. Au niveau des contributions à l'énergie potentielle, l'interaction électrostatique attractive entre les électrons et les noyaux (V_{noy-el}) est stabilisante, alors que les interactions électrostatiques entre électrons (V_{el-el}) et entre noyaux ($V_{noy-noy}$) sont répulsives.

$$\text{Donc :} \quad T = T_e + T_n \quad \text{II.4}$$

Si en utilisant unité atomiques telles que $\hbar = e = m_e = 4\pi\epsilon_0 = 1$

On trouve que :

$$\textcircled{1} T_e = -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i \quad \text{L'opérateur de l'énergie cinétique des électrons}$$

$$\textcircled{2} T_n = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{\Delta_k}{M_K} \quad \text{L'opérateur de l'énergie cinétique des noyaux}$$

M_K : la masse de noyau

$$\text{Et} \quad V = V_{ee} + V_{nn} + V_{ne} \quad \text{II.5}$$

Tel que :

$$\textcircled{1} V_{ee} = \sum_i \sum_j \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad \text{L'opérateur de l'énergie de répulsion entre des électrons (deux par deux)}$$

$$\textcircled{2} V_{nn} = \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k Z_l}{|R_k - R_l|} \quad \text{L'opérateur de l'énergie d'interaction entre des noyaux (deux par deux)}$$

$$\textcircled{3} V_{en} = -\sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k}{|r_i - R_k|} \quad \text{L'opérateur de l'énergie d'attraction noyaux -électrons}$$

Donc le hamiltonien total d'un cristal pourra prendre la forme suivante :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i - \frac{1}{2} \sum_k \frac{\Delta_k}{M_K} + \sum_i \sum_j \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k Z_l}{|R_k - R_l|} + \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_k}{|r_i - R_k|} \quad \text{II.6}$$

Sous cette forme, l'équation de Schrödinger est trop complexe pour pouvoir être résolue analytiquement. On peut simplifier grandement ce hamiltonien en se plaçant dans

l'approximation de Born-Oppenheimer proposé par Max Born (1882-1970) et Robert Oppenheimer (1904-1967) qui simplifie l'équation de Schrödinger [3].

II.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer :

Cette approximation est fondée sur l'approximation adiabatique qui déclare l'existence d'une grande différence de masse entre les électrons et les noyaux [4,5]. Les noyaux sont très lourds par rapport aux électrons (environ 2000 fois), donc le mouvement de noyaux est considéré négligeable par rapport à celui des électrons. Dans ce contexte, l'énergie cinétique des noyaux est nulle ($T_{\text{noy}} = 0$) et l'énergie coulombienne ($V_{\text{noy-noy}}$) due à la répulsion entre noyaux devient une constante.

Cette approche conduit à un Hamiltonien pour lequel les électrons se déplacent dans un champ créé par une configuration statique des noyaux [6].

Le Hamiltonien électronique peut ainsi être défini comme:

$$H = T_e + V_{ee} + V_{ne}$$

L'équation de Schrödinger est donc réécrite de la façon suivante :

$$H_e \cdot \Psi_e(R, r) = E_e(R) \cdot \Psi_e(R, r)$$

Où, $\Psi_e(R, r)$ est la fonction d'onde électronique, H_e est l'hamiltonien électronique, avec:

$$H_e = -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i + \sum_i \sum_j \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_k \sum_{l>k} \frac{Z_K}{|r_i - R_K|}$$

Malgré, la réduction de la complexité du problème, la résolution de l'équation (II.6), reste difficile, et pour simplifier d'avantage, on a désormais recours à d'autres approximations.

II.1.3 Approximation de Hartree-fock :

L'approximation DOUGLAS HARTREE a été aperçue en 1928, il est basé sur l'hypothèse d'électron libres, c'est-à-dire qu'il considère que chaque électron évolue dans le champ créé par les autres électrons. Cela se traduit par un produit de fonctions d'onde comme une fonction totale du système [7] :

$$\Psi(r^{\rightarrow}_1, r^{\rightarrow}_2, \dots, r^{\rightarrow}_N) = \Psi_1(r^{\rightarrow}_1) \Psi_2(r^{\rightarrow}_2) \dots \Psi_N(r^{\rightarrow}_N) \tag{II.7}$$

Mais tant que l'électron est un fermion donc la fonction d'onde totale doit être symétrique par rapport à l'échange de deux particules quelconques qui est négligé par Hartree.

Pour corriger ce défaut en 1930 Fock a proposé d'appliquer le principe d'exclusion de Pauli qui impose à deux électrons de même nombres quantiques de ne pouvoir occuper simultanément le même état quantique.

La théorie de Hartree Fock est l'une des théories approximatives les plus simples pour résoudre l'hamiltonien à plusieurs corps. Il est basé sur une simple approximation de la véritable fonction d'onde à plusieurs corps: la fonction d'onde est donnée par un seul déterminant de Slater de N spin-orbitales [8,9]

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_i(x_1) \psi_j(x_1) \dots \psi_k(x_1) \\ \psi_i(x_2) \psi_j(x_2) \dots \psi_k(x_2) \\ \vdots \\ \psi_i(x_N) \psi_j(x_N) \dots \psi_k(x_N) \end{vmatrix} \quad \text{II.8}$$

où les variables x incluent les coordonnées de l'espace et du spin. Ce simple ansatz pour la fonction d'onde ψ capture une grande partie de la physique requise pour des solutions précises de l'hamiltonien. Plus important encore, la fonction d'onde est antisymétrique par rapport à un échange de toutes les positions de deux électrons. Cette propriété est requise par le principe d'exclusion de Pauli, c'est-à-dire

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = -\psi(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)$$

Cette fonction d'onde peut être insérée dans l'hamiltonien, équation (II.6), et une expression de l'énergie totale dérivée. En appliquant le théorème que la valeur d'un déterminant est inchangée par toute transformation linéaire non singulière, nous pouvons choisir le ψ pour être un ensemble orthonormé. Nous introduisons maintenant un multiplicateur de Lagrange ϵ_i pour imposer la condition que les ψ soient normalisés, et minimiser par rapport au ψ

$$a \quad \frac{\delta}{\delta \psi} \left[\langle \hat{H} \rangle - \sum_i \epsilon_i \int |\psi_j|^2 dr \right] = 0 \quad \text{II.9}$$

Une énorme simplification des expressions pour les résultats orbitales ψ . Ils se réduisent à un ensemble d'équations à un électron de la forme

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i(r) + V_{ion}(r) \psi_i(r) + U(r) \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \quad \text{II.10}$$

où $U(r)$ est un potentiel non local et le potentiel ionique local est noté V_{ion} . Les équations à un électron ressemblent aux équations de Schrödinger à une seule particule.

$$\epsilon_i \psi_i(r) = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ion}(r) \right) \psi_i(r) + \sum_i \int dr' \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r-r'|} \psi_i(r) - \sum_j \delta_{\sigma_i \sigma_j} \int dr' \frac{\psi_j^*(r') \psi_i(r')}{|r-r'|} \psi_i(r)$$

II.11

Le côté droit des équations se compose de quatre termes. Le premier et le second donnent lieu à la contribution d'énergie cinétique et au potentiel électron-ion. Le troisième terme, ou terme de Hartree, est le potentiel simplement électrostatique résultant de la distribution de charge des N électrons. Tel qu'il est écrit, le terme inclut une auto-interaction non physique d'électrons lorsque $j = i$. Ce terme est annulé dans le quatrième, ou terme d'échange. Le terme d'échange résulte de notre inclusion du principe de Pauli et de la forme déterminante supposée de la fonction d'onde. L'effet de l'échange est que les électrons de spin similaire s'évitent les uns aux autres. Chaque électron d'un spin donné est par conséquent entouré d'un "trou d'échange", un petit volume autour de l'électron que l'électron de même spin évite.

L'approximation de Hartree-Fock correspond à l'image conventionnelle à un électron de la structure électronique: la distribution des N électrons est donnée simplement par la somme des distributions à un électron $|\psi|^2$. Cela permet des concepts tels que l'étiquetage des électrons par moment angulaire ("un électron 3d dans un métal de transition"), mais il faut se rappeler qu'il s'agit d'un artefact de l'ansatz initial et que dans certains systèmes des modifications sont nécessaires à ces idées.

La théorie de Hartree-Fock, en supposant une forme à un seul déterminant pour la fonction d'onde, néglige la corrélation entre les électrons. Les électrons sont soumis à un potentiel non local moyen provenant des autres électrons, ce qui peut conduire à une mauvaise description de la structure électronique. Bien que qualitativement correcte dans de nombreux matériaux et composés, la théorie de Hartree-Fock n'est pas suffisamment précise pour faire des prédictions quantitatives précises.

II.2 La théorie fonctionnelle de la densité :

La théorie fonctionnelle de la densité a été développée par Hohenberg et Kohn [1] et Kohn et Sham [2]. Il évite l'augmentation dramatique de l'espace de Hilbert avec la taille du système en remplaçant la fonction d'onde complexe à plusieurs corps (r_1, \dots, r_N) par la densité de charge plus simple comme objet de base de la théorie.

II.2.1 Théorème de Hohenberg-Kohn :

La procédure standard de traitement d'un système de mécanique quantique consiste à configurer son hamiltonien et à trouver les fonctions d'onde qui résolvent l'équation de Schrödinger correspondante. Toute quantité mesurable de ce système peut alors être calculée à partir des valeurs d'espérance d'un opérateur correspondant pour ces fonctions d'onde. On

peut montrer que la connaissance de la fonction d'onde de l'état fondamental suffit à elle seule à identifier. Le système de mécanique quantique auquel il appartient, c'est-à-dire qu'il détermine l'hamiltonien jusqu'à une constante. Pour le dire autrement, toute quantité mesurable est une fonction unique de la fonction d'onde de l'état fondamental.

Le premier théorème de Hohenberg-Kohn stipule que la connaissance de la densité de l'état fondamental suffit à elle seule pour déterminer l'hamiltonien jusqu'à une constante. Par conséquent, toute quantité mesurable est une fonction unique de la densité de l'état fondamental. Par exemple, il existe une fonctionnelle d'énergie $E[n(r)]$ unique, qui permet de calculer l'énergie de l'état fondamental à partir de la densité $n(r)$. Comme l'énergie cinétique et l'interaction coulombienne entre les électrons sont des fonctionnelles universelles, on peut écrire pour la fonctionnelle énergétique

$$E[n(r)] = F[n(r)] + \int v(r)n(r)d^3r \quad \text{II.12}$$

où le potentiel externe

$$v(r) = - \sum_{\mu=1}^M \frac{e^2 Z_{\mu}}{|r - \tau_{\mu}|}$$

est généré par les nucléons et $F[n(r)]$ est la fonction unique de l'énergie cinétique plus l'énergie d'interaction de Coulomb entre les électrons. La combinaison de ce résultat avec le principe variationnel de Ritz conduit au deuxième théorème de Hohenberg-Kohn: étant donné le potentiel externe $v(r)$, la densité de l'état fondamental correspondant $n(r)$ minimise la fonctionnelle

$$E_v[n(r)] = F[n(r)] + \int v(r)n(r)d^3r \quad \text{II.13}$$

sous la contrainte que le nombre total d'électrons est maintenu fixe. Ainsi, le deuxième théorème de Hohenberg-Kohn fournit une recette pour le calcul de la densité de l'état fondamental.

Il est commode de séparer l'énergie classique de Coulomb de $F[n(r)]$ et d'écrire

$$F[n(r)] = \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3r' d^3r + G[n(r)] \quad \text{II.14}$$

avec $G[n(r)]$ est également une fonctionnelle universelle. Ensuite, l'expression de la fonctionnelle énergétique (II.12) devient

$$E_v[n(r)] = G[n(r)] + \int v(r)n(r)d^3r + \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3r' d^3r \quad \text{II.15}$$

II.2.2 Les équations de Kohn-Sham :

Malheureusement, la fonctionnelle $G[n(r)]$ n'est pas connu exactement et doit être approximée. Afin de construire une telle approximation, il a été proposé par Kohn et Sham [2]

d'introduire un système de référence de N électrons non interactifs se déplaçant dans un potentiel effectif V_{eff} , où la densité électronique $n(\mathbf{r})$ est en accord avec celle de système en interaction.

La fonction d'onde de l'état fondamental de ce système de référence est simplement donnée par le déterminant de Slater d'un ensemble de N fonctions d'onde à particule unique, $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$, qui satisfont l'ensemble des équations de type Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad \text{II.16}$$

qui sont appelées équations de Kohn-Sham. Les fonctions d'onde ψ_i sont appelées fonctions d'onde de Kohn-Sham. Il est clair que la densité à l'état fondamental de ce système est calculée de la manière suivante:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad \text{II.17}$$

L'expression de la fonctionnelle énergétique du système de référence sans interaction est

$$E_s[n] = T_s[n] + \int V_{\text{eff}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3r \quad \text{II.18}$$

où l'indice «s» signifie «particule unique». Selon le deuxième théorème de Hohenberg-Kohn, l'état fondamental du système de référence minimise la fonctionnelle d'énergie $E_s[n]$ sous la contrainte de nombre d'électrons fixe. En utilisant des multiplicateurs de Lagrange ϵ_i pour prendre en compte ces contraintes, la minimisation de la fonctionnelle d'énergie $E_s[n]$ reproduit l'ensemble des équations différentielles (2.16).

La fonctionnelle énergétique du système en interaction est écrite sous forme :

$$E_v[n] = T_s[n] + \frac{1}{2} \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' d^3r + \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3r + E_{xc}[n] \quad \text{II.19}$$

avec la fonctionnelle de corrélation d'échange : $E_{xc}[n] = G[n] - T[n]$ II.20

La fonctionnelle de corrélation d'échange exacte est inconnue comme $G[n]$ est inconnue, mais il existe des approximations très fiables ont été développées pour $E_{xc}[n]$. Minimisation de la fonction énergétique Eq. (II.19) sous la contrainte d'un nombre d'électrons fixe donne un deuxième ensemble d'équations de type Schrödinger. Si le potentiel effectif est choisi en fonction

$$V_{\text{eff}} = \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' + v(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad \text{II.21}$$

Le premier ensemble d'équations, Eq. (II.16), devient équivalent à ce deuxième ensemble d'équations de type Schrödinger, et la densité à l'état fondamental du système de référence non interactif est identique à la densité à l'état fondamental du système interactif. L'équation du potentiel effectif, Eq. (II.21), doit être résolu de manière auto-cohérente avec l'Eq. (II.16) et Eq. (II.17): Pour une densité $n(\mathbf{r})$ donnée on établit le potentiel effectif en fonction de l'Eq.

(II.21) et résout les équations de Kohn-Sham, Eq. (II.16), qui fournit les fonctions d'onde φ_i nécessaires pour calculer une nouvelle densité $n(r)$ selon l'Eq. (II.17), qui est utilisé pour calculer à nouveau le potentiel effectif. Lorsque l'auto-cohérence est atteinte, la densité d'entrée, qui est utilisée pour calculer le potentiel effectif, est égale à la densité de sortie, qui est calculée à partir des fonctions d'onde de Kohn-Sham ψ_i . L'énergie de l'état fondamental du système en interaction est donnée par

$$E = \sum_i n_i \epsilon_i - \int n(r) V_{eff}(r) d^3r + \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3r' d^3r + \int v(r)n(r) d^3r + E_{xc}[n] \quad \text{II.22}$$

n_i spécifie l'occupation de l'état i .

II.2.3 Théorie fonctionnelle de la densité de spin :

Pour les systèmes magnétiques, la discussion précédente doit être étendue. Au lieu de la densité électronique seule, nous utilisons maintenant la densité électronique $n(r)$ et la densité de spin $m(r)$ comme variables fondamentales de la théorie. Si les états occupés sont donnés en fonction des fonctions de spin (d'onde) à deux composants

$$\psi_i(r) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow,i}(r) \\ \psi_{\downarrow,i}(r) \end{pmatrix} \quad \text{II.23}$$

la densité de l'électron et de spin sont donnés par

$$n(r) = \sum_{i,\sigma=\uparrow,\downarrow} |\psi_{\sigma,i}(r)|^2 \quad \text{II.24}$$

$$m(r) = \sum_i (\psi_i(r))^* \sigma \psi_i(r) \quad \text{II.25}$$

La fonctionnelle de corrélation d'échange $E_{xc}[n,m]$ dépend à la fois de la densité électronique et de la densité de spin. En tant qu'équations de Kohn-Sham, nous obtenons maintenant l'ensemble des équations de type Pauli

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{eff}(r) + \sigma \cdot B^{xc}(r) \right] \psi_i(r) = E_i \psi_i(r) \quad \text{II.26}$$

Avec $B^{xc}(r)$ est le champ d'échange

$$B^{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n,m]}{\delta m(r)} \quad \text{II.27}$$

Dans cette forme générale, Eq. (2.16) peut être utilisé pour traiter le magnétisme non colinéaire. Si $B_{xc}(r)$ a une direction fixe dans l'espace, par ex. $B^{xc}(r) = B^{xc}(r) e_z$ Eq. (2.26) décrit le magnétisme colinéaire et peut être écrite sous forme de deux équations, une pour chaque spin ou composante :

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{eff}(r) + B^{xc}(r) \right] \psi_{\uparrow,i}(r) = E_{\uparrow,i} \psi_{\uparrow,i}(r) \quad \text{II.28}$$

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta + V_{eff}(r) - B^{xc}(r) \right] \psi_{\downarrow,i}(r) = E_{\downarrow,i} \psi_{\downarrow,i}(r) \quad \text{II.29}$$

II.2.4 L'approximation de la densité de spin locale :

Alors que la théorie de la fonctionnelle de densité fournit un cadre théorique exact pour le traitement des systèmes à plusieurs corps, les applications pratiques souffrent du manque de connaissance de la fonctionnelle exacte d'échange-corrélation, pour laquelle des approximations doivent être développées.

Malgré cet inconvénient, de nombreux solides peuvent être décrits étonnamment bien par ces approximations de la théorie fonctionnelle de la densité. Une approximation largement utilisée est l'approximation de densité de spin locale (LSDA). Au sein du LSDA, l'énergie de corrélation d'échange s'est approchée comme suit:

$$E_{xc}[n, m] = \int n(r) \epsilon_{xc}(n(r), m(r)) d^3r \quad \text{II.30}$$

où $\epsilon_{xc}(n(r), m(r))$ est la densité de corrélation d'échange du gaz d'électrons libres avec des paramètres $n(r)$ et $m(r)$.

Au sein du LSDA, le champ d'échange est parallèle à l'aimantation

$$B^{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n, m]}{\delta m(r)} = n(r) \frac{\partial \epsilon_{xc}(n(r), m(r))}{\partial m(r)} \hat{m} \quad \text{II.31}$$

c'est-à-dire que nous pouvons écrire

$$B^{xc}(r) = B^{xc}(n(r), m(r), \hat{m}(r)) \quad \text{II.32}$$

II.2.5 L'approximation du gradient généralisée :

Pour améliorer certains nombres de problèmes de la L(S)DA pour certaines applications, il faut introduire des termes en gradient dans l'expression de l'énergie d'échange et de corrélation, c à d en tenant compte de l'inhomogénéité de la densité électronique. Cette amélioration est connue sous le nom de l'approximation du Gradient Généralisée (GGA). ou l'énergie E_{xc} est en fonction de la densité d'électron et de son gradient:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}^{hom}[\rho(r), \nabla\rho(r)] \int \rho(r) \epsilon_{xc}^{hom}[\rho(r), \nabla\rho(r)] dr^3$$

La GGA est donné par différentes paramétrisations, nous pouvons citer entre autres celle de Perdew et Wang (PW91) [10], Perdew, Burke et Ernzerhof (GGA-PBE) [11] et Perdew et al. (GGA-PBESol) [12]. Généralement, la GGA améliore par rapport à la LDA un certain nombre de propriétés comme l'énergie totale ou l'énergie de cohésion. Dans le présent travail nous avons utilisé une des plus simples d'entre elles, proposée par Perdew et al. (GGA-PBESol) [12], qui donne des résultats tout à fait satisfaisants.

II.2.6 Effet de la correction d'Hubbard :

L'étude des propriétés électroniques et magnétiques des est l'une des principaux objectifs de notre travail car on a étudié un matériau qui est à base de métaux de transition qui ont la couche électronique « 3d » partiellement remplie, ce qui représente l'origine du magnétisme pour ces matériaux. Les électrons de cette couche électronique sont connus par leur forte corrélation et la fonctionnelle GGA (et ses différentes versions) ne traite pas avec précision ce genre d'interaction entre 3d-électrons et elle donne de faux comportements électroniques. Par exemple, elle montre un comportement métallique pour les isolants de Mott tandis qu'ils sont semi-conducteurs ou isolant et ils montrent le même comportement pour les composés demi-métaux à base de ; métaux de transition, terres rares et lanthanides [13]...

Dans le cadre de ce travail, on a choisi la correction d'Hubbard qui s'ajoute à la fonctionnelle GGA et qu'on appelle généralement GGA+U ou bien GGA+Ueff. Cette correction est représentée par le terme de l'interaction effective de coulomb entre deux électrons du même site.

II.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) :

Afin de résoudre les équations de Kohn-Sham, Eq. (2.16), numériquement, il faut calculer les éléments de la matrice de l'opérateur de Hamilton pour un ensemble de base donné. Bien que le choix des ondes planes comme fonctions de base soit très attrayant, la description des oscillations rapides de la fonction d'onde près du noyau dans un ensemble de bases d'ondes planes est inefficace. Il est naturel de faire la distinction entre la région de l'espace où les ondes planes fournissent une bonne description des fonctions d'onde et les régions de l'espace autour des atomes, où les fonctions d'onde sont semblables à des atomes. Nous désignons le premier par région interstitielle (INT) et le second par régions de muffintin (MT). L'approche par ondes planes augmentées (APW), initialement proposée par Slater [14, 15], utilise un ensemble de bases mixtes pour les régions INT et MT: dans la région interstitielle, les ondes planes sont utilisées pour représenter les fonctions d'onde, tandis qu'à l'intérieur des sphères MT, les fonctions d'onde sont développées en termes de solutions des équation de Dirac relativiste scalaire, qui est résolue pour un ensemble de paramètres d'énergie et pour la composante sphérique symétrique du potentiel. Les fonctions de base sont étiquetées par les indices d'ondes planes interstitielles.

À l'intérieur des sphères MT, les ondes planes sont remplacées par une combinaison linéaire des solutions radiales de l'équation de Dirac relativiste scalaire de telle sorte que la fonction

de base est continue à la limite de la sphère MT. Par conséquent, les fonctions de base APW sont

$$\phi_g^{(k)}(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k+g).r} & r \in \text{INT} \\ \sum_L [a_L^{\mu g} u_{1,l}^{\mu g}(r') Y_L(r')] & r \in \text{MT}_\mu \end{cases} \quad \text{II.33}$$

où nous notons les solutions radiales de l'équation de Dirac relativiste scalaire pour l'atome μ par $u_{1,l}^{\mu g}(r)$, $r' = (r - \tau^\mu)$ est le vecteur de position par rapport au centre τ^μ de l'atome μ , et $L = (l, m)$ est une notation compacte pour le moment cinétique. Pour garder la notation simple, nous n'écrivons pas explicitement la k -dépendance du coefficient $a_L^{\mu g}$. Cependant, une base APW indépendante de l'énergie définie comme dans Eq. (II.33) n'offre pas une liberté variationnelle suffisante. L'utilisation d'un ensemble de base APW dépendant de l'énergie est possible mais implique une dépendance énergétique de l'opérateur hamiltonien, ce qui augmente considérablement la complexité du problème des valeurs propres. Andersen a proposé [16] de linéariser ce problème de valeurs propres non linéaires en utilisant des combinaisons linéaires des deux fonctions radiales $u_{1,l}^{\mu g}(r)$ et leurs dérivées $\dot{u}_{1,l}^{\mu g}(r)$ par rapport à l'énergie de telle sorte que la fonction de base et sa première dérivée soient continues à la limite de la sphère MT. Les fonctions de base qui en résultent sont appelées ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) et sont données par

$$\phi_g^{(k)}(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k+g).r} & r \in \text{INT} \\ \sum_L [a_L^{\mu g} u_{1,l}^{\mu g}(r') + b_L^{\mu g} \dot{u}_{1,l}^{\mu g}(r')] Y_L(r') & r \in \text{MT}_\mu \end{cases} \quad \text{II.34}$$

La fonction radiale $u_{1,l}^{\mu g}(r)$ est une solution de l'équation scalaire relativiste de Dirac à l'énergie $E_{1,l}^\mu$, qui peut être calculée à partir des valeurs propres et des charges partielles correspondantes.

Afin de décrire les états semi-cœur, l'ensemble de base LAPW peut être complété par des orbitales locales (OL). Contrairement aux fonctions de base LAPW définies dans Eq. (2.34) un orbital local est nul partout dans l'espace à l'exception à l'intérieur de la sphère MT de cet atome, dont il décrit les états semi-cœur. Dans la méthode FL-APW, les orbitales locales pour un moment angulaire l sont construites comme une combinaison linéaire d'une solution $u_{2,l}^\mu$ de l'équation d'onde relativiste scalaire à l'énergie $E_{2,l}^\mu$ de l'état semi-cœur et les solutions radiales $u_{1,l}$ et $\dot{u}_{1,l}$ utilisées pour décrire les états de valence. Les coefficients de cette combinaison

linéaire sont déterminés de telle sorte que les fonctions de base résultantes et leur dérivée radiale soient égales à zéro à la limite muffin-étain:

$$\phi_{LO}^{(k)}(r) = \begin{cases} 0 & r \in \text{INT} \\ \sum_L [a_L^{\mu,LO} u_{1,l}^\mu(r') + b_L^{\mu,LO} \dot{u}_{1,l}^\mu(r') + c_L^{\mu,LO} u_{2,l}^\mu] Y_L(r') & r \in \text{MT}_\mu \end{cases} \quad \text{II.35}$$

Les solutions radiales $u_{1,l}^\mu(r)$ et leurs dérivées d'énergie $\dot{u}_{1,l}^\mu(r)$ résolvent les équations

$$\begin{aligned} [\hat{H}^{\mu, sph} - E_{1,l}] r u_{1,l}^\mu(r) &= \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V^{\mu, sph}(r) - E_{1,l} \right] r u_{1,l}^\mu(r) = 0 \\ [\hat{H}^{\mu, sph} - E_{1,l}] r \dot{u}_{1,l}^\mu(r) &= \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V^{\mu, sph}(r) - E_{1,l} \right] r \dot{u}_{1,l}^\mu(r) = 0 \end{aligned} \quad \text{II.36}$$

La dérivée de l'énergie $\dot{u}_{1,l}^\mu(r)$ et la fonction radiale $u_{1,l}^\mu(r)$ sont orthogonales et $u_{1,l}^\mu(r)$ est normalisé

$$\begin{aligned} \int r^2 u_{1,l}^\mu(r) u_{1,l}^\mu(r) dr &= 1 \\ \int r^2 u_{1,l}^\mu(r) \dot{u}_{1,l}^\mu(r) dr &= 0 \\ \int r^2 \dot{u}_{1,l}^\mu(r) \dot{u}_{1,l}^\mu(r) dr &= N_l^\mu \end{aligned} \quad \text{II.37}$$

L'opérateur Hamiltonien $\hat{H}^{\mu, sph}$ dans Eq. (II.36) contient le terme $-\frac{1}{2}\Delta$, qui agit en tant qu'opérateur pour l'énergie cinétique. Lorsque nous calculons des éléments de matrice, nous utilisons à la place une forme symétrisée de l'opérateur d'énergie cinétique afin d'obtenir une matrice hamiltonienne hermitienne.

$$-1/2\Delta \overset{\Rightarrow}{\rightarrow} -1/4\Delta \overset{\Leftarrow}{\rightarrow} -1/4\Delta \quad \text{II.38}$$

où la double flèche indique si l'opérateur de Laplace différencie les objets à sa gauche ou à sa droite. Par conséquent, la partie sphérique de la matrice hamiltonienne est donnée par

$$\begin{aligned} H_{g,g'}^{\mu, sph} &= \sum_L \int dr r^2 [a_L^{\mu,g} u_{1,l}^\mu + b_L^{\mu,g} \dot{u}_{1,l}^\mu]^* \hat{H}^{\mu, sph} [a_L^{\mu,g'} u_{1,l}^\mu + b_L^{\mu,g'} \dot{u}_{1,l}^\mu] \\ &= \sum_L [(a_L^{\mu,g})^* a_L^{\mu,g'} E_{1,l} + \frac{1}{2} (a_L^{\mu,g})^* b_L^{\mu,g'} + \frac{1}{2} (b_L^{\mu,g})^* a_L^{\mu,g'} + (b_L^{\mu,g})^* b_L^{\mu,g'} E_{1,l} N_l^\mu] \end{aligned} \quad \text{II.39}$$

La partie non sphérique du potentiel est étendue à un produit de fonctions radiales et d'harmoniques sphériques:

$$V^{\mu, NS}(r) = \sum_L V_L^\mu(r) Y_L(r) \quad \text{II.40}$$

Définir les éléments de la matrice

$$\begin{aligned}
 I_{l',l,L''}^{\mu,u,u} &= \int dr r^2 u_{1,l}^{\mu} u_{1,l}^{\mu}(r) V_{L''}^{\mu}(r) \\
 I_{l',l,L''}^{\mu,\dot{u},u} &= \int dr r^2 u_{1,l}^{\mu} \dot{u}_{1,l}^{\mu}(r) V_{L''}^{\mu}(r) \\
 I_{l',l,L''}^{\mu,\dot{u},\dot{u}} &= \int dr r^2 \dot{u}_{1,l}^{\mu} \dot{u}_{1,l}^{\mu}(r) V_{L''}^{\mu}(r) \\
 I_{l',l,L''}^{\mu,\ddot{u},u} &= \int dr r^2 \ddot{u}_{1,l}^{\mu} \dot{u}_{1,l}^{\mu}(r) V_{L''}^{\mu}(r)
 \end{aligned} \tag{II.41}$$

et leurs contractions avec les coefficients de Gaunt

$$\begin{aligned}
 t_{L',L}^{\mu,u,u} &= \sum_{L''} I_{l',l,L''}^{\mu,u,u} G(L', L, L'') \\
 t_{L',L}^{\mu,u,\dot{u}} &= \sum_{L''} I_{l',l,L''}^{\mu,u,\dot{u}} G(L', L, L'') \\
 t_{L',L}^{\mu,\dot{u},u} &= \sum_{L''} I_{l',l,L''}^{\mu,\dot{u},u} G(L', L, L'') \\
 t_{L',L}^{\mu,\dot{u},\dot{u}} &= \sum_{L''} I_{l',l,L''}^{\mu,\dot{u},\dot{u}} G(L', L, L'')
 \end{aligned} \tag{II.42}$$

Nous pouvons écrire la contribution non sphérique à l'hamiltonien comme suit:

$$\begin{aligned}
 H_{g,g}^{\mu, sph} &= \\
 \sum_{L,L'} [(a_{L'}^{\mu,g})^* t_{L',L}^{\mu,u,u} a_L^{\mu,g'} + (b_{L'}^{\mu,g})^* t_{L',L}^{\mu,\dot{u},\dot{u}} b_L^{\mu,g'} + (a_{L'}^{\mu,g})^* t_{L',L}^{\mu,u,\dot{u}} b_L^{\mu,g'} + (b_{L'}^{\mu,g})^* t_{L',L}^{\mu,\dot{u},u} a_L^{\mu,g'}]
 \end{aligned} \tag{II.43}$$

En éq. (II.39) et Eq. (II.43) nous avons spécifié les contributions MT en éléments de matrice LAPW-LAPW. Les orbitales locales conduisent à des éléments de matrice LO-LO, LO-LAPW et LAPW-LO supplémentaires, qui sont obtenus de manière analogue aux éléments de matrice LAPW-LAPW. La contribution interstitielle à la matrice hamiltonienne est donnée par

$$H_{g,g}^{INT} = \frac{1}{V} \int_{INT} dr^3 e^{-i(g+k).r} (-1/4\overleftarrow{\Delta} - 1/4\overrightarrow{\Delta} + V(r)) e^{-i(g'+k).r} \tag{II.44}$$

Les fonctions de base LAPW ne sont pas orthogonales et la matrice de chevauchement S doit donc être calculée. Les contributions de MT à la matrice de chevauchement

$$S_{g,g}^{\mu} = \sum_L [(a_L^{\mu,g})^* a_L^{\mu,g'} + (b_L^{\mu,g})^* b_L^{\mu,g'} N_L^{\mu}] \tag{II.45}$$

et la contribution interstitielle est

$$S_{g,g}^{INT} = \frac{1}{V} \int_{INT} dr^3 e^{-i(g'-g).r} \tag{II.46}$$

II.4 La Méthode APW+Lo :

Un avantage évident de l'ensemble de la basis APW, Eq. (II.33), sur l'ensemble de la base LAPW, Eq. (II.34), est que l'ensemble de base APW ne souffre pas de la rigidité due à l'imposition de la contrainte de continuité sur la première dérivée des fonctions de base LAPW. Les orbitales locales peuvent être utilisé pour remplacer la liberté variationnelle manquante de la base APW. L'ensemble de base résultant est appelé APW + lo [17]. Contrairement aux orbitales locales décrites ci-dessus (et aux LO abrégées), qui servent à décrire les états semi-core, les orbitales locales pour APW + lo (qui sont abrégées los), sont générées à partir de la fonction d'onde radiale et de son dérivé d'énergie, évalué aux mêmes paramètres énergétiques que les APW

$$R_L^{lo}(r) = a_L^{lo} \mu_{1,l}(r) + b_L^{lo} \dot{\mu}_{1,l}(r) \quad \text{II.47}$$

Où le coefficient a_L^{lo} est fixé à 1 et b_L^{lo} est choisi tel que $R_L^{lo} = 0$ à la limite MT. La fonction de base résultante

$$\phi_{lo}^{(k)}(r) = \begin{cases} 0 & r \in \text{INT} \\ \sum_L [a_L^{lo} u_{1,l}^\mu(r') + b_L^{lo} \dot{u}_{1,l}^\mu(r')] Y_L(r') & r \in \text{MT}_\mu \end{cases} \quad \text{II.48}$$

Présente un pli au niveau de la limite du MT comme les APW. Ce coude contribue au terme A l'intérieur des MT-sphères, les ondes planes sont remplacées par une combinaison linéaire de la radiale

$$\int_{\partial \text{MT}} \frac{1}{2} (\Phi_G(r))^* \left(\frac{\partial \Phi_{G'}^{MT}}{\partial r} - \frac{\partial \Phi_{G'}^{NTT}}{\partial r} \right) dS \quad \text{II.49}$$

à l'énergie cinétique, où les exposants MT et INT signifient que les dérivés sont évalués à l'aide de la fonction muffin-tin et de la forme interstitielle des fonctions de base, respectivement, et l'intégration est effectuée sur la surface muffin-tin. En utilisant l'opérateur nabla au lieu du laplacien pour exprimer l'énergie cinétique dans l'interstitiel, la contribution interstitielle à l'intégrale de surface disparaît

$$-\frac{1}{2} \left[\int_{\text{INT}} (\Phi_G(r))^* \Delta(\Phi_{G'}(r)) d^3r + \int (\Phi_G(r))^* \frac{\partial \Phi_{G'}^{NTT}}{\partial r} dS \right] = \frac{1}{2} \int_{\text{INT}} (\Phi_G(r))^* \nabla(\Phi_{G'}(r)) d^3r \quad \text{II.50}$$

Afin de calculer la contribution MT à l'énergie cinétique, il est plus pratique d'utiliser le laplacien. Dans ce cas, le terme de surface de l'Eq. (II.38) doit être ajouté:

$$-\frac{1}{2} \left[\int_{\text{MT}} (\Phi_G(r))^* \Delta(\Phi_{G'}(r)) d^3r + \int_{\partial \text{MT}} (\Phi_G(r))^* \frac{\partial \Phi_{G'}(r)}{\partial r} dS \right] \quad \text{II.51}$$

II.5 Le calcul du plein potentiel (FP-LAPW)

Dans les systèmes solides, tels que les systèmes ouverts ou en couches, l'approximation muffin-boîte n'est plus utile en raison de désaccords avec les résultats expérimentaux. Par conséquent, aucune approximation de forme n'est meilleure dans de telles conditions. Le potentiel sans approximation de forme est élargi comme suit

$$V(r) \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm} Y_{lm} & \text{à l'intérieur de la sphere} \\ \sum_{lm} V_{lm} \exp(ikr) & \text{dehors de la sphere} \end{cases} \quad \text{II.52}$$

Cette forme générale est appelée calcul du plein potentiel. Dans la méthode FP-LAPW, on peut choisir les rayons des sphères sans avoir le choix approprié.

En approximation MT, cependant, il faut choisir les rayons des sphères dans la moyenne des valeurs réelles [18].

Dans la forme générale, la méthode LAPW étend le potentiel sous la forme **éq II.52**. et les densités de charge de manière analogue. Ainsi, aucune approximation de forme n'est faite, une procédure souvent appelée méthode du "plein potentiel".

L'approximation "muffin-tin" utilisée dans les premiers calculs de bande correspond à ne retenir que la composante $L = 0$ et $M = 0$ dans la première expression de **éq.II.52** et seulement la composante $K = 0$ dans la seconde. Cette procédure (beaucoup plus ancienne) correspond à la prise de la moyenne sphérique à l'intérieur des sphères et de la moyenne en volume dans la région interstitielle.

L'énergie totale est calculée selon Weinert et al [19]. Les unités atomiques de Rydberg sont utilisées sauf en interne dans les programmes de type atomique (LSTART et LCORE) ou dans le sous-programme outwin (LAPW1, LAPW2), où les unités Hartree sont utilisées. La sortie est toujours donnée en unités Rydberg.

Les forces au niveau des atomes sont calculées selon Yu et al [20]. Pour la mise en œuvre de ce formalisme dans WIEN, voir Kohler et al [21] et Madsen et al. 2001. Une formulation alternative de Soler et Williams [22] a également été testée et jugée équivalente, à la fois en efficacité de calcul et en précision numérique et le code respectif est disponible auprès de M.Fähnle (Krimmel et al [23]).

L'énergie de Fermi et les poids de chaque état de bande peuvent être calculés en utilisant une méthode de tétraèdre modifié (Bloechl et al. [24]), un schéma gaussien ou un schéma d'élargissement de la température.

Les interactions spin-orbite peuvent être envisagées via une seconde étape variationnelle en utilisant les fonctions propres scalaires-relativistes comme base. (Voir MacDonald [25]),

Singh [26] et Novak [27]). Afin de surmonter les problèmes dus à la fonction de base radiale $p_{1/2}$ manquante dans la base scalaire-relativiste (qui correspond à $p_{3/2}$, nous avons récemment étendu la base LAPW standard par une orbitale locale $p_{1/2}$ supplémentaire, c'est-à-dire une LO avec une fonction de base $p_{1/2}$, qui est ajoutée dans le calcul SO de seconde variation (Kunes et al. 2001).

Il est bien connu que pour les électrons localisés (comme les états 4f dans les lanthanides ou les états 3d dans certains oxydes de TM), la méthode LDA (GGA) n'est pas assez précise pour une description correcte. Ainsi, nous avons mis en œuvre diverses formes de la méthode LDA + U ainsi que la méthode de polarisation orbitale (OP) (voir Novak 2001 et les références y figurant).

On peut également envisager des interactions avec un champ magnétique externe (voir Novak 2001) ou électrique (via une approche supercellulaire, voir Stahn et al. 2000).

II.6 Self consistant de la fonctionnelle de densité:

La résolution des équations de Kohn-Sham nécessite le choix d'une base pour les fonctions d'onde que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales appelées orbitales de Kohn-Sham écrites sous forme:

$$\psi_j(\vec{r}) = \sum C_{j\alpha} \phi_\alpha \quad \text{II.53}$$

Où: les $\psi_j(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les $C_{j\alpha} \phi_\alpha$ sont les fonctions de l'expansion.

Puisque l'énergie totale est vibrationnelle dans la DFT, la solution auto-cohérente des équations de **KS** revient à déterminer les $C_{j\alpha}$ pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. La résolution des équations de KS pour les points de symétrie dans la première zone de Brillouin permet de simplifier les calculs. Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itération auto-cohérent illustré par l'organigramme de **la figure (II.1)**. On commence par injecter la densité de charge initiale ρ_{in} pour diagonaliser l'équation séculaire:

$$(H - \epsilon_j S) C_j = 0 \quad \text{II.54}$$

Avec : H représente la matrice Hamiltonienne et S la matrice de recouvrement

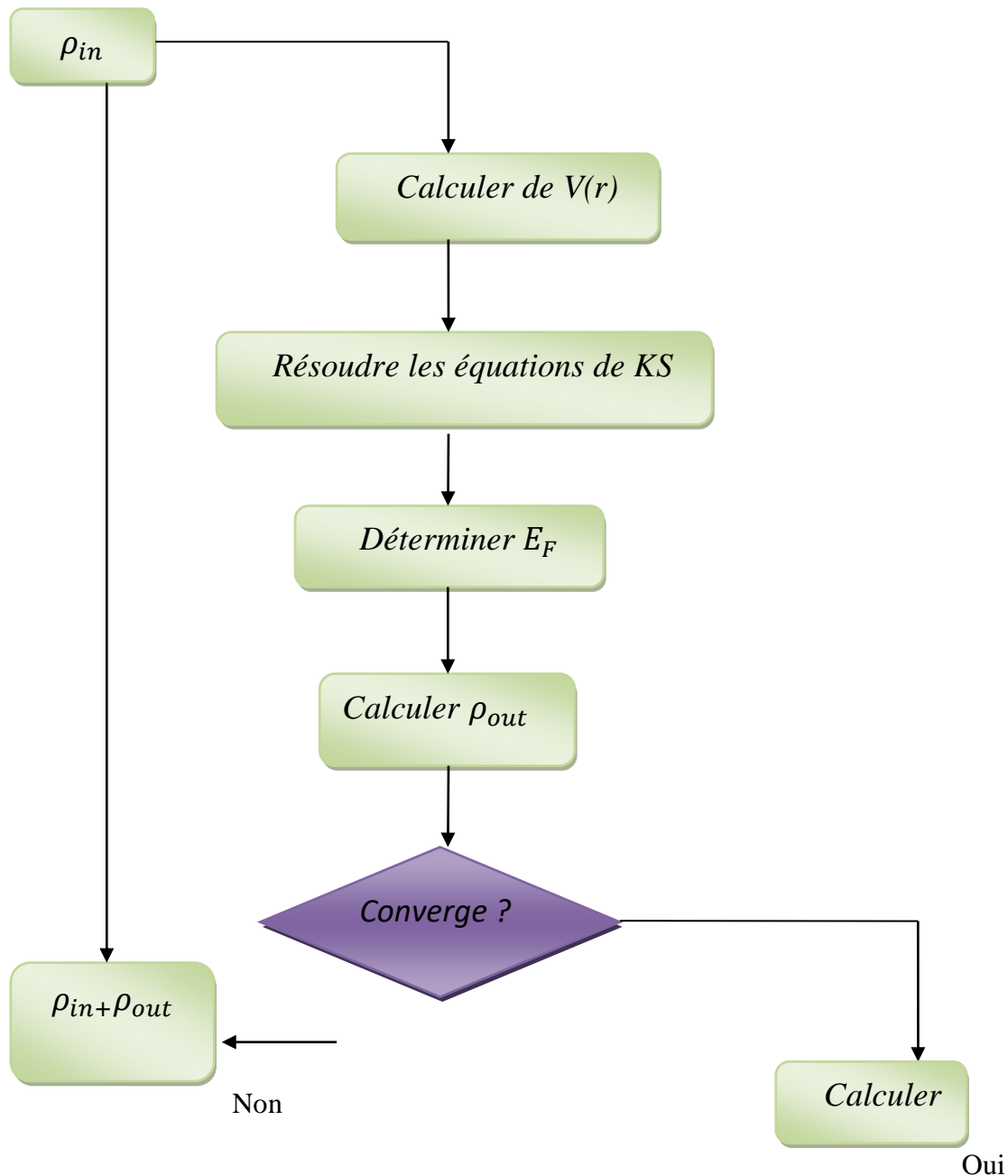


Figure (II.1): Le schéma du calcul self consistant de la fonctionnelle de densité

II.6.a) Code Wien2k

WIEN2k se compose de nombreux programmes individuels et la plupart d'entre eux ont leur propre fichier d'entrée. Bien que cela semble très fastidieux au début, il y a des entrées par défaut pour tous les programmes et plusieurs outils pour modifier les paramètres les plus importants à la volée. Dans w2web, la prochaine étape serait de vérifier la symétrie de la

structure nouvellement générée et générer les fichiers d'entrée pour le Calcul SCF (initialiser @ w2web). L'utilisateur peut fournir quelques paramètres (nécessaires uniquement si l'on veut changer les valeurs par défaut, voir ci-dessous) et exécutez les étapes suivantes en mode batch ou étape par étape

- **nn**: détermine les distances entre tous les atomes jusqu'à deux fois la distance de plus proche voisin. De plus, il vérifie les sphères qui se chevauchent et émet un message d'erreur si les sphères se chevauchent. Il vérifie également si des éléments identiques ont le même environnement et les regroupe éventuellement en ensembles équivalents.
- **sgroup**: vérifie la structure et détermine le groupe spatial. Il regroupera les atomes en ensembles équivalents selon les positions de Wyckoff du groupe spatial correspondant. De plus, il vérifiera et déterminera la plus petite cellule possible (primitive) et créera le fichier de structure correspondant si nécessaire. Par exemple, si l'on entre dans la structure NaCl en tant que structure cubique primitive avec quatre atomes Na et quatre Cl, cela créera automatiquement une cellule primitive FCC avec un seul atome de Na et Cl.
- **symmetry**: recherche les opérations de symétrie du groupe d'espace ainsi que la symétrie du groupe de points de chaque atome et l'expansion LM correspondante pour la densité / potentiel
- **lstart**: Résout numériquement l'équation radiale de Dirac pour les atomes libres et crée des densités atomiques. En utilisant les valeurs propres (ou la localisation dans les sphères atomiques) de tous les états atomiques, il les regroupe en états de noyau et de valence. Il sélectionne automatiquement les LO pour les états semi-core et écrit les paramètres d'énergie de départ E_l dans case.in1 (pendant le cycle SCF, ils sont recherchés et adaptés automatiquement pour garantir les meilleurs réglages possibles dans tous les cas).
- **kgen**: génère un k-mesh équidistant décalé ou non décalé avec une densité spécifiée par l'utilisateur dans la partie irréductible de la BZ.

II.6.b) Cycle SCF

Le cycle SCF consiste en WIEN2k d'un flux de travail complexe utilisant plusieurs programmes différents. Les principales étapes sont les suivantes:

- **lapw0**: calcul le potentiel Coulombien et le potentiel d'échange-correlation XC à partir de la densité.
- **lapw1**: calcul les valeurs propres de valence et semi-core et vecteurs propres à tous les points k demandés
- **lapw2**: calcul la densité électronique de valence

- **lcore**: calcul les valeurs propres du coeur et la densité du coeur
- **mixer**: additionne les densités de noyau et de valence et mélange les densité totale avec les densités des itérations précédentes. De plus, il peut mettre à jour les positions atomiques en fonction des forces calculées ainsi que les matrices de densité ou potentiels orbitaux lorsque DFT + U ou méthodes hybrides sur site sont utilisés.

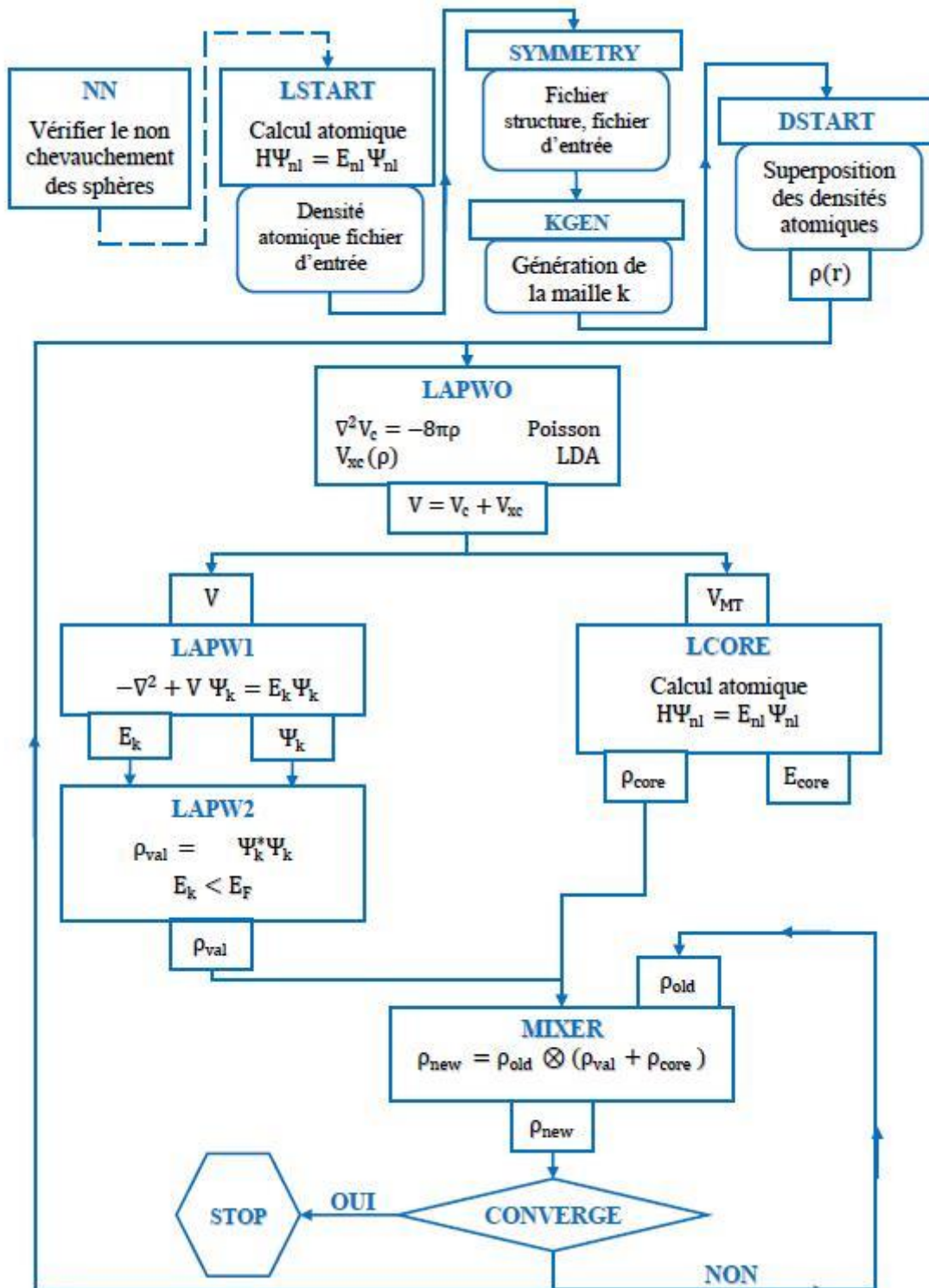


Figure II.2. L'organigramme du code WIEN2k

Références :

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864, 1964.
- [2] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133, 1965
- [3] Hohenberg and W.Kohn, *phys.Rev.*136, B864(1964)
- [4] W.Kohn L.J.Sham, *Phys.Rev.* .136, B1133 (1965)
- [5] E. Wigner, *Phys. Rev.* 46, 1001 (1934).
- [6] D. M. Ceperly and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* 45, 566 (1980)
- [7] A. Szabo. N ,Ostlund, S. *Modern Quantum Chemistry*. Mineola, New York.Dover Publishing. (1996)
- [8] V. Fock, *Z. Ann. Physik.* 62, 795 (1930)
- [9] J.c. Slater. *Phys. Rev.* 34, 1293 (1929)
- [10] J.P. Perdew, Y. Wang, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 13244
- [11] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865
- [12] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 136406
- [13] V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A.I. Lichtenstein, *J. Phys.: Condens. Matter* 9 (1997)767
- [14] J. C. Slater. Wave functions in a Periodic Potential. *Phys. Rev.*, 51:846, 1937
- [15] T. L. Loucks. *Augmented Plane Wave Method*. W. A. Benjamin, Inc., New York, 1967
- [16] O. K. Andersen. Linear methods in band theory. *Phys. Rev. B*, 12:3060, 1975
- [17] G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöorstedt, and L. Nordström. Efficient linearization of the augmented plane-wave method. *Phys. Rev. B*, 64:195134, 2001
- [18] Plaha, P. Schwarz, K. Madsen, G. Kvasnicka D. and Luitz, J. Wien2k, An augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. Karlheinz Schwarz Techn. Austria: Universitat Wien; 2001
- [19] Weinert M., Wimmer E., and Freeman A.J. 1982 *Phys. Rev. B*26, 4571
- [20] Yu R., Singh D. and Krakauer H. 1991, *Phys.Rev.* B43, 6411
- [21] Kohler B., Wilke S., Scheffler M., Kouba R. and Ambrosch-Draxl C. 1996 *Comp.Phys.Commun.* 94, 31

- [22] Soler J.M. and Williams A.R. 1989, Phys.Rev. B40, 1560
- [23] Krimmel H.G., Ehmann J., Elsässer C., Fähnle M. and Soler J.M. 1994, Phys.Rev. B50, 8846
- [24] Blöchl P.E., Jepsen O. and Andersen O.K. 1994, Phys. Rev B 49, 16223
- [25] MacDonald A. H., Pickett, W. E. and Koelling, D. D. 1980 J. Phys. C 13, 2675
- [26] Singh D. 1994, Plane waves, pseudopotentials and the LAPW method, Kluwer Academic
- [27] Novak P. 1997

The background of the slide is white and decorated with several black graduation caps (mortarboards) and pieces of gold confetti scattered across the surface. The caps are shown from various angles, some with their tassels hanging down. The confetti consists of small, curved, spiral-like shapes.

Résultats et Discussion

Résultats et Discussion

Introduction :

La détermination des propriétés structurales est une première étape très importante pour avoir des informations sur les propriétés du matériau à étudier du point de vue microscopique, ceci avant d'accéder à d'autres propriétés physiques (électroniques, magnétiques, etc ...). Pour avoir une prédiction sur ces propriétés on utilise les méthodes du premier principe qui sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.

III.1 Detaille de calcul :

Pour traiter nos matériaux on a choisit les méthodes du premier principe qui sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT (Density Functional Theory) [1,2] avec la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total plus l'orbitale local FP-LAPW +LO (full-potential linearized Augmentes Plane Wave plus local-orbital method) [3] introduit dans le code Wien2k [4] ou le potentielle d'échange et corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé GGA de Perdew-Burke-Ernzer PBEsol.

La méthode a été appliquée pour étudier les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de composé monoxyde de l'euporium EuO dopé au chrome Cr ($\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$), à la concentration $x=0.25, 0.5$ et 0.75 . Pour $x = 0,25$ et $0,75$, on obtient un super celle de 8 atomes de structure cubique appartenant au groupe spatial $F\bar{4}3m$ (N°216) et pour $x = 0.50$ la structure est tétragonale de groupe spatial $P4/mmm$ (N°123).

Dans la méthode (FP-LAPW), la maille élémentaire est divisée en deux régions :

la région des sphères atomiques qui ne se chevauchent pas (dites sphères muffin-tin), centrées sur les noyaux de rayon R_{MT} , les rayons muffin-tin choisit pour les éléments de nos matériau sont : 2.05, 2.35 et 1.9ua pour Cr, Eu et O respectivement. La région interstitielle située entre les sphères. Les fonctions de base, les densités électroniques et le potentiel sont calculés avec la géométrie du champ self-consistent.

Ces quantités sont développées en combinaisons d'harmoniques sphériques dans les sphères atomiques avec un rayon de coupure (cut-off) $l_{max}=10$, et sous forme de combinaison d'onde planes avec une coupure correspondant à $K_{max} \times R_{MT} = 7$ (R_{MT} est le plus petit rayon des sphères muffin-tin et K_{max} représente le plus grand vecteur d'onde dans l'extension des ondes planes d'écrivant la région interstitielle). Les résultats sont obtenus avec une convergence en énergie de l'ordre de 10^{-4} Ry. $G_{max}=12$ est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes de la densité de charge.

Nous avons utilisé pour l'échantillonnage de la zone de Brillouin 2000 k-points spéciaux équivalents à une grille [12x12x12].

Les configurations électroniques pour le composé **EuCrO** est **Eu** ([Xe] 4f⁷6s²) ; **Cr** ([Ar] 3d⁵4s¹) et **O** ([He] 2s²2p⁴).

Les paramètres du réseau de l'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume, et en utilisant l'équation de Murnaghan [5] donnée par :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'P}{B}\right) \quad (\text{III-1})$$

Le module de compressibilité (B) est calculé par expression suivante :

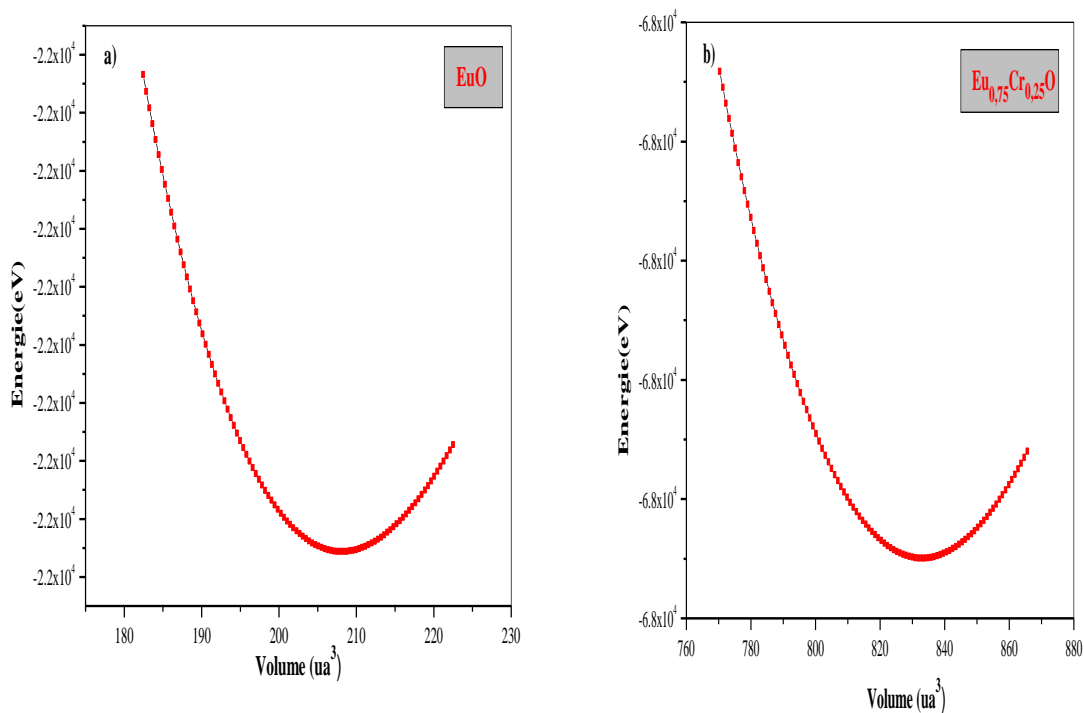
$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-2})$$

Le module de compression à l'équilibre est évalué en ajustant la courbe de variation de l'énergie totale, en fonction du volume obtenue en fin de cycle à l'équation de Murnaghan [6] donnée par :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right) - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III-3})$$

La figure III.1 représente la variation de l'énergie avec le volume pour nos composés : **EuO**, **Eu_{0.25}Cr_{0.75}O** et **Eu_{0.75}Cr_{0.25}O**.

La figure III.2 représente la variation de a) l'énergie de la cellule tétragonale en fonction de rapport c/a, b) l'énergie de la cellule en fonction de volume



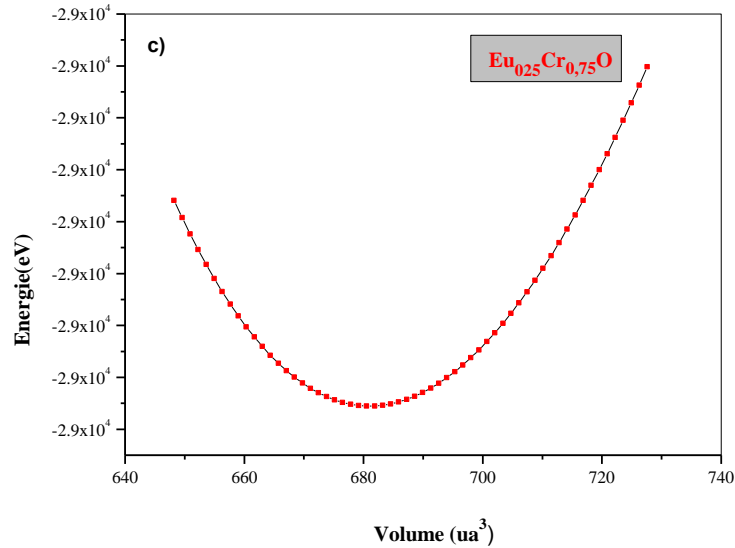
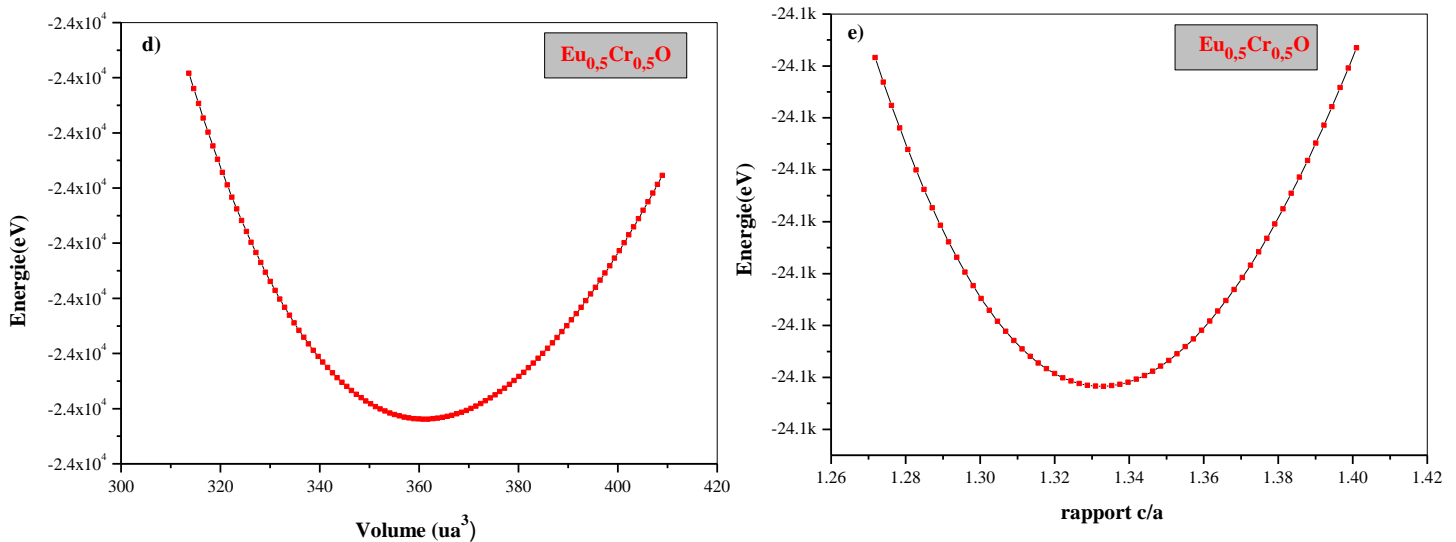


Figure III-1 : Variations des énergies totales en fonction des volumes des matériaux EuO et $Eu_{1-x}Cr_xO$. (a) EuO, (b) $Eu_{0.75}Cr_{0.25}O$, (c) $Eu_{0.25}Cr_{0.75}O$.



La figure III.2 représente la variation de d) l'énergie de la cellule tétragonale en fonction de rapport c/a, e) l'énergie de la cellule en fonction de volume.

III-2 Propriété structurale des composé EuO et $Eu_{1-x}Cr_xO$:

III-2.1 Monoxyde de l'euprium EuO :

Monoxyde de l'euprium a une structure Roksalt (CFC)NaCl ($Fm\bar{3}m$, N=225) avec l'atome de Eu occupe la sommet de cube en position (0,0,0) et l'oxygène positionné au centre de cube (1/2,1/2,1/2) **figure III-3**. Afin de déterminer les déférents paramètres structuraux d'EuO à l'équilibre thermodynamique.

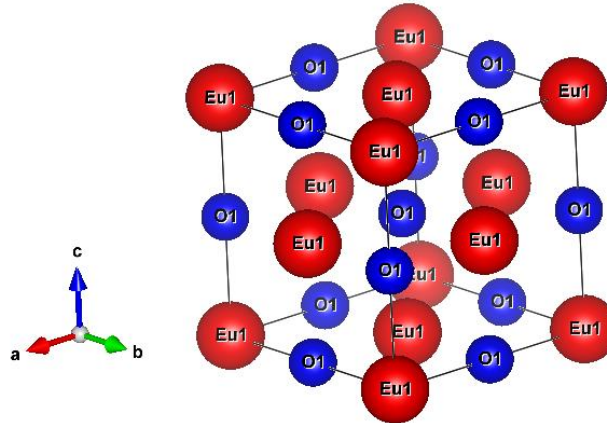


Figure III-3: Structure cristalline de composé EuO

III-2-2 Structure $Eu_{1-x}Cr_xO$:

a) L'énergie de formation :

L'énergie de formation moyenne d'un matériau c'est l'énergie nécessaire pour séparer ses composantes en atomes libres. C'est une mesure de l'intensité de la force qui se lie à l'ensemble des atomes qui sont en corrélation avec la stabilité structurale de l'état fondamental.

L'énergie de formation d'un cristal (E_f) est définie comme étant la différence entre l'énergie du cristal, et la somme des énergies des éléments constituant ce cristal, dans leurs états standards (un corps est dit à l'état standard lorsqu'il est pur, non mélangé et dans son état physique le plus stable).

Si l'énergie de formation est négatif donc le composé peut former et être stable thermodynamiquement.

Le composé EuO existe expérimentalement, et l'énergie de formation de EuCrO donné par la relation suivante :

$$E_f = E_{\text{tot}}(\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}) - [(1-x)E(\text{Eu}) + xE(\text{Cr}) + E(\text{O})]$$

(III-4)

Tableau III.1 : représente les énergies de formations de composées $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.

Composées	L'énergie de formation Ef(Ry)
$\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$	-0.296
$\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$	-2.18
$\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$	-0.464

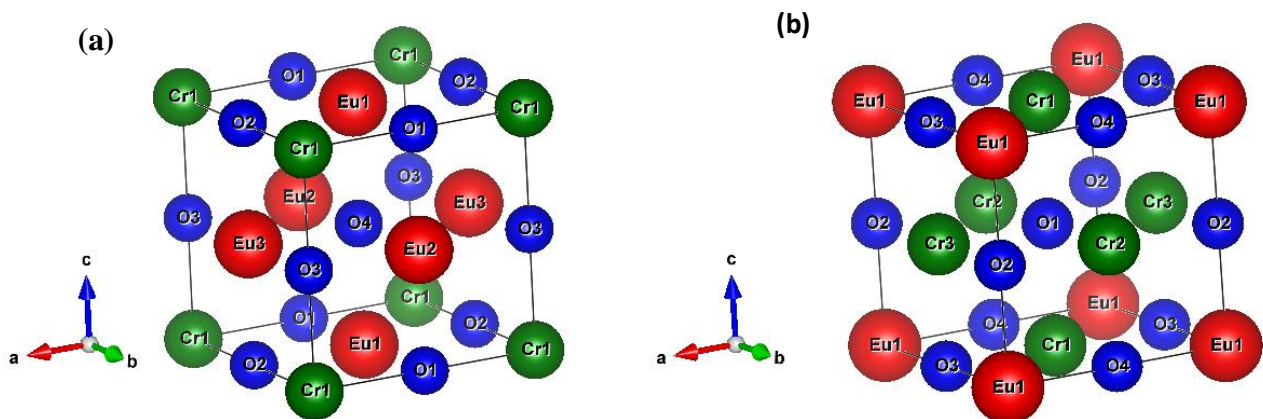
D'après les résultats présentés dans le **tableau III.1**, nous constatons que le composé $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$ est formé car on a trouvé les énergies négatives. Ça nous indique que le composé doit être stable à l'équilibre thermodynamique.

b) Présentation de structure $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$:

Les composés $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$ avec les trois concentrations $x=0.25, 0.5$ et 0.75 ; Nous choisissons l'insertion des défauts dans le réseau à travers de la substitution l'atome d'euprium par l'atome de chrome dans une super cellule qui contient 8 atomes.

Pour $x = 0,25$, on a substitue un atome de chrome a la place d'un atome de l'euprium au sommet du cube , pour la concentration 0.75 on a introduit dans la cellule trois atomes de chrome a la place de trois atomes de l'euprium et pour $x = 0.50$ la cellule de matériau hôte est distordue pour construire une structure tétragonale de groupe spatial $P4/mmm$ ($N^\circ 123$), dans cette cellule on a substitué un atome de chrome a la place d'un atome de l'euprium puisque la cellule contient quatre atomes (2 atomes de Eu et 2 atomes de O).

La Structure cristalline de composé $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ avec trois concentration $x=0.25, 0.5$ et 0.75 ; sont représentées sur **la figure III-4**.



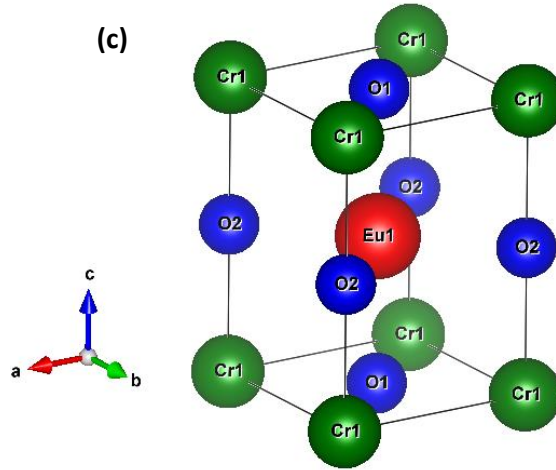


Figure III-4 : Structure cristalline de composé $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$

(a) $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, (b) $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$, (c) $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$.

Pour déterminer les différentes propriétés de l'état fondamental, il est nécessaire de procéder à l'optimisation de l'énergie totale pour le système étudié. La procédure commune utilisée pour déterminer ces propriétés consiste à effectuer un calcul « Self-consistant » de l'énergie totale pour les différentes valeurs de volume de la maille élémentaire (\mathbf{a}_0).

Par la suite, on détermine les paramètres structuraux à l'équilibre comme la constante du réseau d'équilibre (\mathbf{a}_0), le module de compressibilité (\mathbf{B}) et sa première dérivée par rapport à la pression (\mathbf{B}') et le minimum de l'énergie totale (E_0) de EuO et $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ aux différentes concentrations $x=0.25, 0.5$ et 0.75 .

Le tableau III.2 ci-dessous représente des différents calculs théoriques et expérimentales de (paramètres des réseaux (\mathbf{a}_0), les modules de compressibilités (\mathbf{B}), et leurs premières dérivées (\mathbf{B}') des composés. EuO et $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.

	a(Å)	B(GPa)	B'	E _{min}
EuO	5.0863	103.67	4.45	-21847.723896
	5.142 ± 0.002 ^a			
	5.1439+0.0005 ^b	110±5 ^d	4.5 ^c	
	4.981 ^c	109.86 ^c		
Eu_{0.75}Cr_{0.25}O	4.979	110.3	4.41	-67792.647475
Eu_{0.5}Cr_{0.5}O	a=3.459	128.74	1.9	-24097.261187
(P4/mmm)	c/a=1.332			
Eu_{0.25}Cr_{0.75}O	4.6558	135.14	4.17	-28596.221105

^aRef[7], ^bRef[8], ^cRef[9], ^dRef[10]

Dans notre cas, la valeur du paramètre de réseau (a_0) de EuO pur est 5.0863 Å, est en bon accord avec des deux valeurs expérimentales citée en références [7,9] car l'erreur type égale 0.01%. Quand on compare nos valeurs du paramètre de réseau (a_0) et du module de compressibilité (B) avec celles de la littérature, on trouve un bon accord avec certains résultats; les écarts observés ont une relation directe avec les paramètres utilisés dans les calculs comme (énergie de séparation, version de l'approximation, les valeurs de $R_{MT} * K_{max}$, énergie de convergence, le nombre de point dans la ZB).

Pour la structure substitué $Eu_{1-x}Cr_xO$ ($x=0.25, 0.5$ et 0.75) on remarque que la valeur de paramètre de maille diminue en fonction d'augmentation de la concentration x de l'impureté de chrome Cr, l'explication possible de la diminution de la valeur de (a_0) peut être due à la distorsion de cube du EuO.

La diminution de la valeur de (a_0) conduisent à l'augmentation du module de compressibilité (B), comme le montre les valeurs du tableau, sa prouve que la dureté de matériau augmente lors de la substitution de oxyde de l'euprium avec Cr.

III.3 Propriétés électroniques :

Les propriétés électroniques du solide dépendent essentiellement de la répartition des électrons dans les bandes de valence et de conduction, ainsi que de la valeur du gap. Pour les systèmes magnétiques, les calculs à spins polarisés sont effectués en utilisant le concept des électrons à spin up et spin-down séparément. Ces propriétés incluent la structure de bande, la densité d'états [11] et la densité de charge.

III.3.1 Structure de bande :

La structure de bande de composée EuO trouvé par l'approximation GGA-PBEsol est montré par la **figure III-5**, cette figure montre les points de hautes symétries dans la première zone de Brillouin, on trace la structure de bande de EuO pour les deux directions spin up (a) et spin down (b). On peut voir que le caractère de ce composé est métal avec un gap direct [X-X], car ce gap est situé sur le même axe de K.

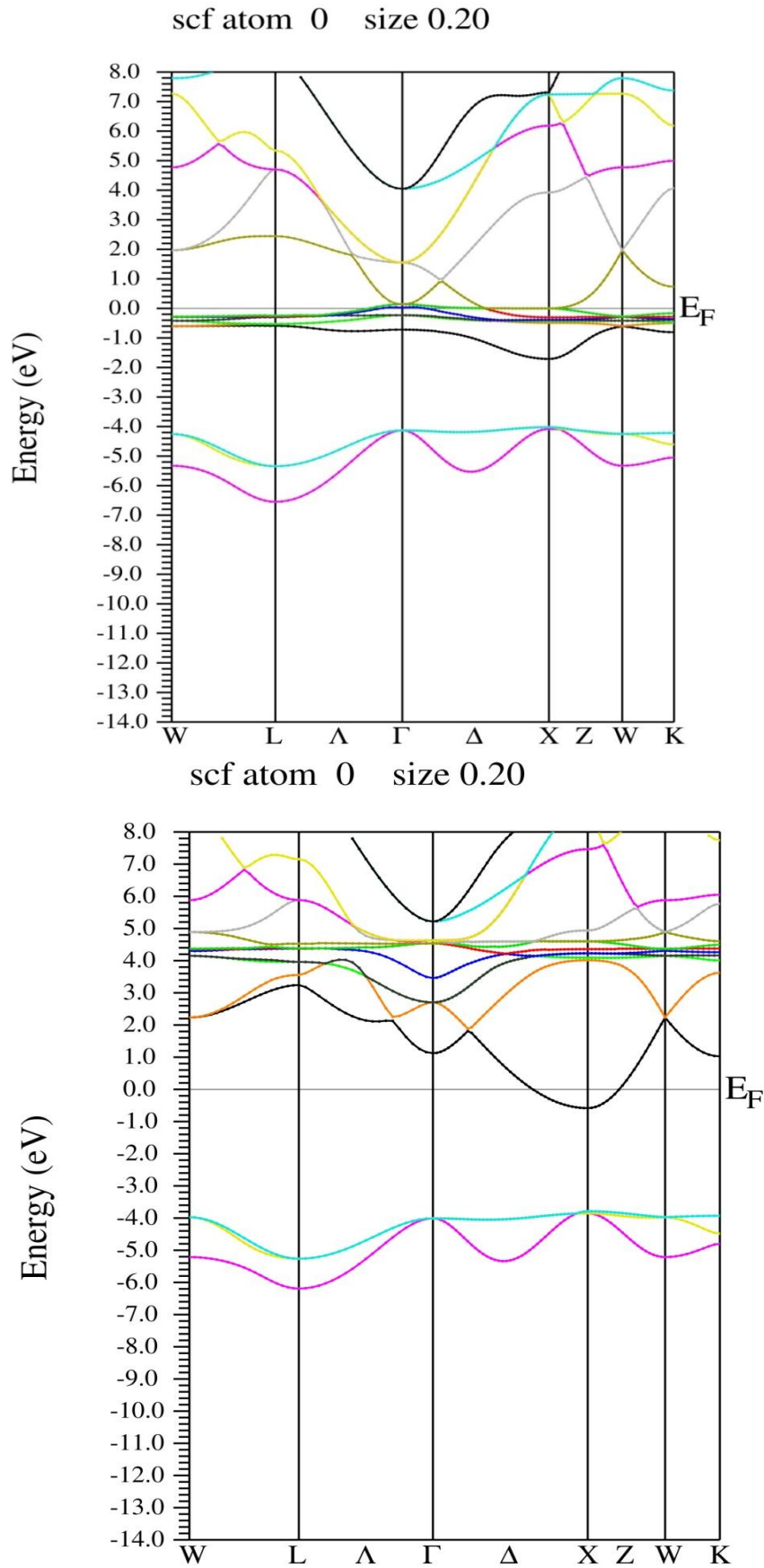
Les **Figures III.6, III.7 et III.8** présentent les structures de bande d'énergie des composés $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ ($x = 0.25, 0.5$ et 0.75), calculées en utilisant l'approximation GGA-PBEsol selon les directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin.

Le centre de la zone de Brillouin est noté Γ , on trace la structure de bande des ces composés pour les deux directions spin up (rouge) et spin down (vert) dans l'intervalle $[-8, 8\text{eV}]$ de telle façon que E_F situé au milieu de la bande interdite $E_F = 0$. On définit le gap d'énergie comme la différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction.

Pour les trois concentrations en remarque un chevauchement entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC) dans une direction de spin Up donc ce composé a un caractère d'un conducteur, après l'utilisation de potentiel coulombienne (U) on a réussi de séparer entre les bandes et le composé devient un demi-métal.

Le composé dopée $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$ possède un gap demi-métallique ferromagnétique direct [X-X] avec une valeur égale à 3.802 eV , et un gap demi-métallique de valeur 0.494 eV , ce gap est le plus petit gap entre le maximum ou le minimum de la BV ou BC et le niveau de Fermi E_F . Ce dernier gap est très important dans les applications de spintronique. Le composé dopée $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ possède un gap demi-métallique ferromagnétique direct [Γ - Γ] avec une valeur égale à 2.948 eV , et un gap demi-métallique de valeur 0.007 eV , et pour le composé $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$ a un gap demi-métallique ferromagnétique direct [Γ - Γ] avec une valeur égale à 3.778 eV , et un gap demi-métallique de valeur 0.195 eV .

Le gap a une antilinéarité à cause de le changement de phase de la cellule à la concentration $x=0.5$.



Figures III-5 : Les structures de bande des spins up et spins down de EuO

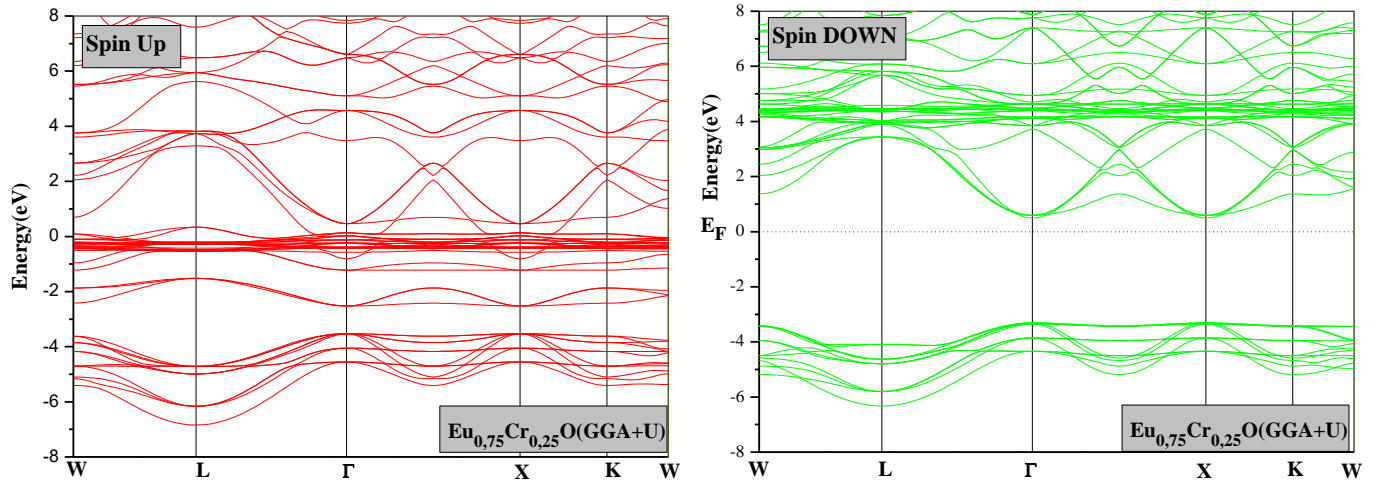


Figure III-6 : Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$.

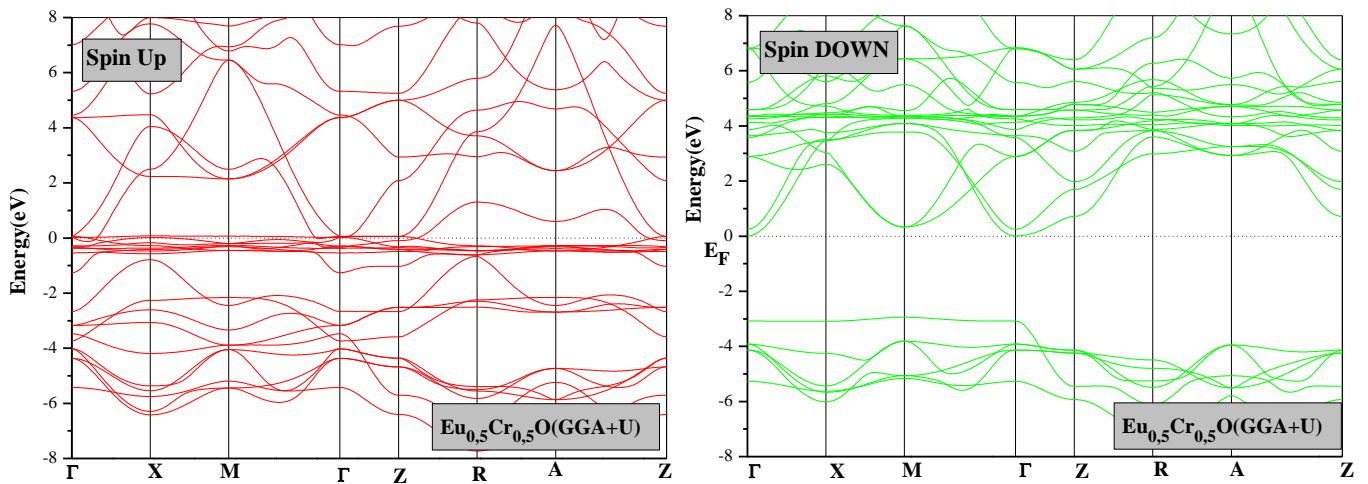


Figure III-7 : Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$.

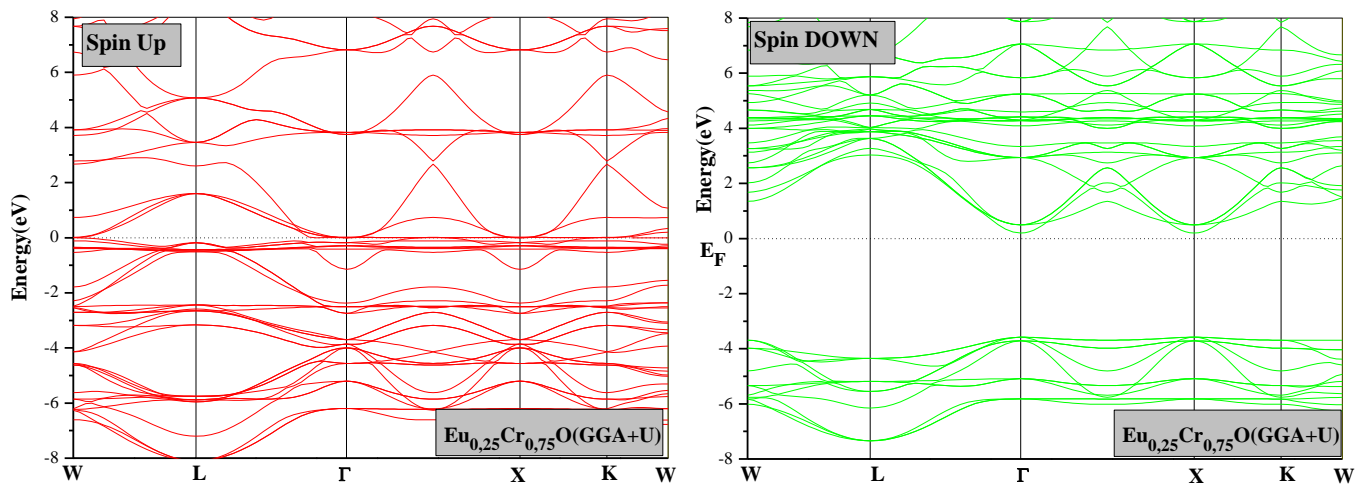


Figure III-8 : Les structures de bande des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.

III.3.2 Densité d'états électroniques (DOS) :

La densité d'états (DOS) est une grandeur physique importante pour la compréhension des propriétés physiques d'un matériau. Pour les composés $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ ($x=0.25, 0.5, 0.75$) elles sont représentées par les **Figures III.9, III.10, III.11**

La densité d'états est définie comme le nombre d'états énergétiques remplis par des électrons dans les deux directions (spin up- spin dn)

Pour éclairer la contribution des orbitales atomiques dans la structures de bandes, il est nécessaire de tracer la densité d'état total des composées. .

La figure III-9 représente la densité d'état total et partiel de composé $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$ dans l'intervalle $[-10,10 \text{ eV}]$. Dans cet intervalle en voit clairement trois régions :

Première région ①: on observe que la contribution de l'atome de **Cr** est très faible à cause de l'influence des orbitales p de l'atome de l'oxygène (figure III.9.b) cette région est suivie par un gap dans la bande de valence de l'ordre 1 eV. Dans la même région l'atome de **Eu** a une forte contribution (figure III.9.c).

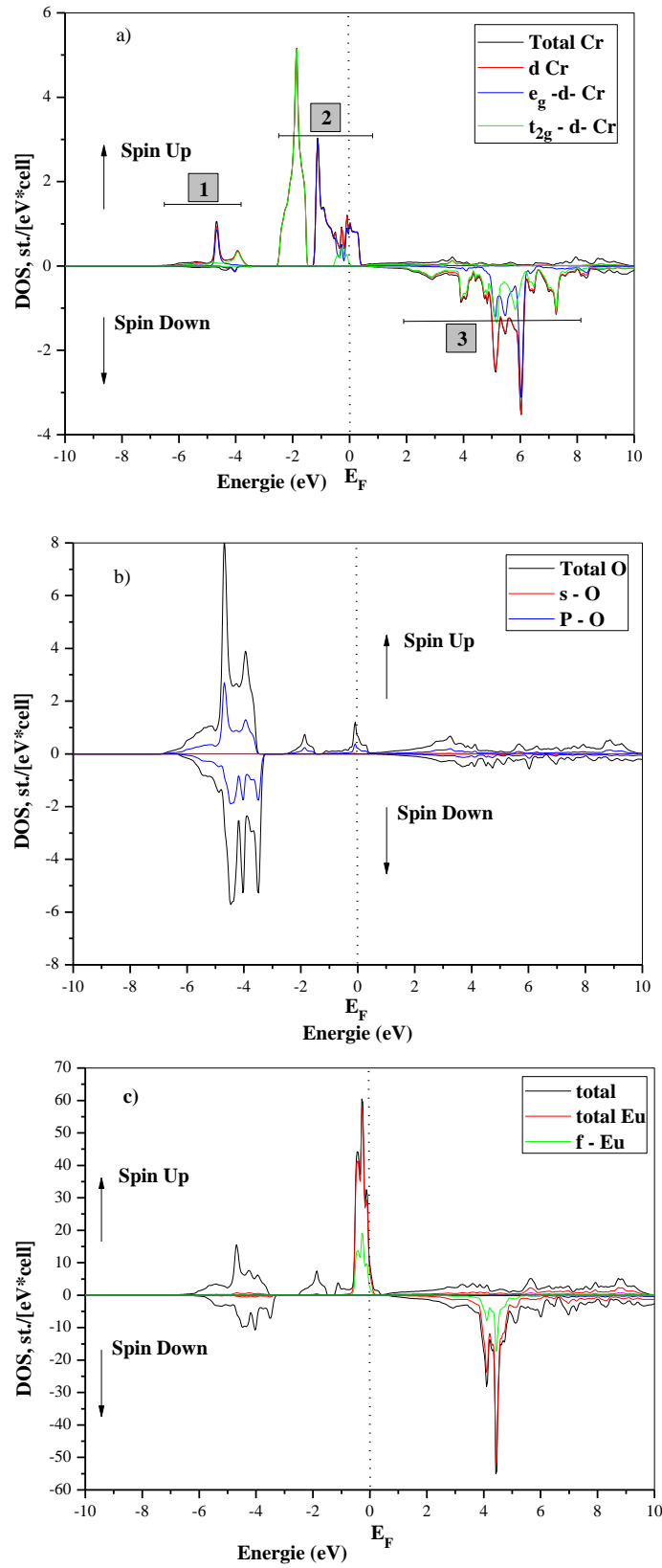
Deuxième région ② : on voit clairement que cette région est située au tour de niveau de Fermi avec une contribution importante de l'atome de chrome qui est l'origine de magnétisme pour ce matériau (figure III.9.a). Due au champ cristallin les états d de **Cr** se divisent en cinq états dégénérés : t_{2g} triplement dégénéré et e_g doublement dégénéré. Ces états sont responsables sur l'ouverture de gap dans les spins majoritaires. L'atome de **O** et **Eu** a aucun effet dans cette

région .Un pic de valeur $5.22 \text{ st}/[\text{eV} \cdot \text{cell}]$ est remarqué près de niveau de fermi juste au dessous de E_F on trouve la troisième région ③ qui est contribue seulement dans les spin minoritaire .Une hybridation forte entre les états **f** de **Eu** et les états **d** de **Cr** . Finalement un gap est crée dans les spins down qui donne le comportement demi-métallique de nos matériau .Ce comportement est due des orbitales **d** de l'atome **Cr** qui pousse les états **f** de **Eu** vers les hautes énergies et laisse derrière lui une lacune de l'ordre 3.8 eV.

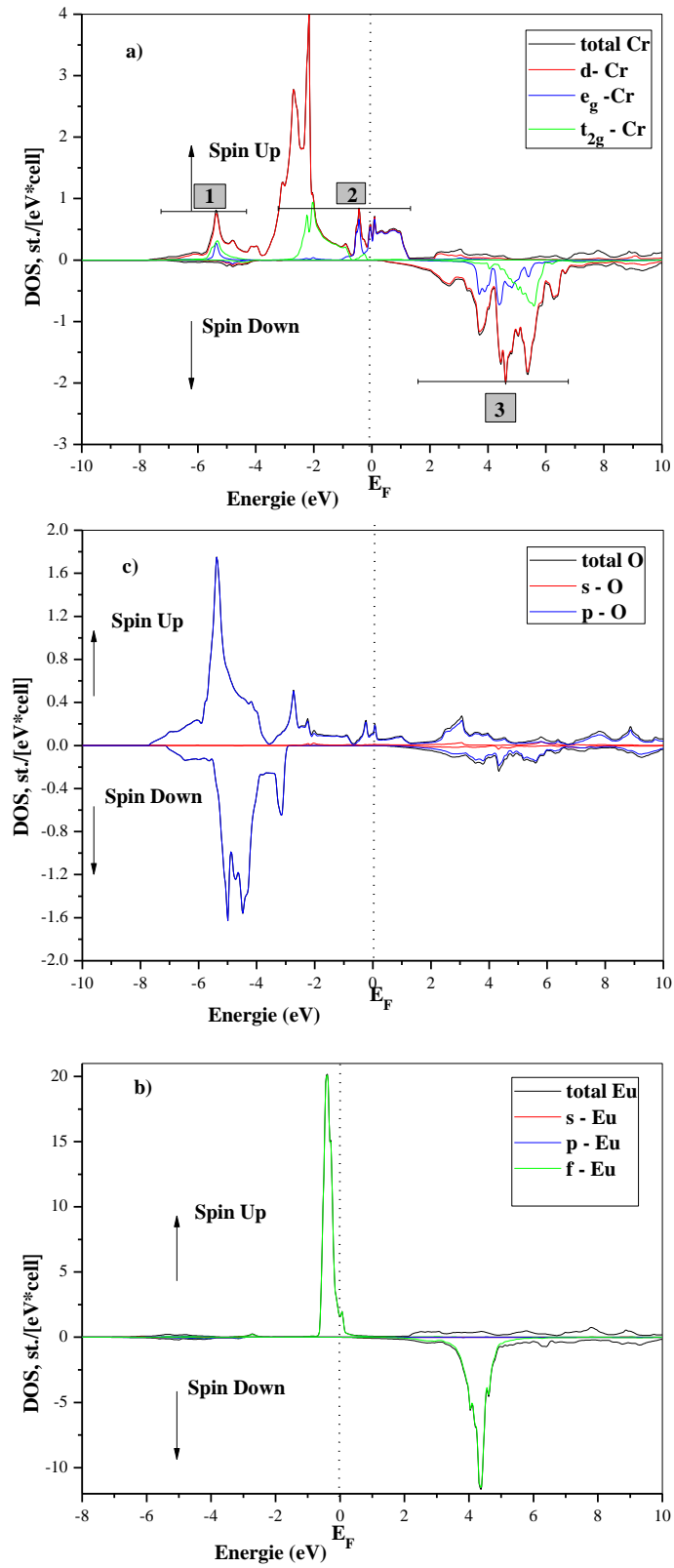
La figure III-10 montrent la densité d'état total et partiel de composé $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ dans l'intervalle $[-10,10 \text{ eV}]$. Cette zone d'énergie est divisée en trois régions :

Dans la première région seulement les états **d-Cr** et **p-O** qui sont un grand effet dans cette gamme d'énergie (figure III.10.a et b) mais les états **p** contribué dans les deux directions de spin. Pour la région ② les états **3d-Cr** et **4f-Eu** ont un effet considérable dans le DOS .Juste au niveau de fermi les états **eg-3d-Cr** qui forme le DOS et par conséquent donne le caractère ferromagnétique de matériau .La manque de ces états dans les spins dn mène le matériau un comportement demi-métallique.

Toujours dans la 3ème région les états **3d** et **4f** de **Cr** et **Eu** respectivement participe au DOS dans les spins dn. On remarque que le poids de DOS au niveau de fermi de l'ordre $1 \text{ st}/[\text{eV} \cdot \text{cell}]$.Un pic de valeur 20.1 (figure III.10.b) est observé pour les états de l'atome de **Eu** pris de niveau de fermi , ce pic est traduit par un grand moment magnétique de cette atome pour ce composé.



Figures III.9 : Les DOS des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$

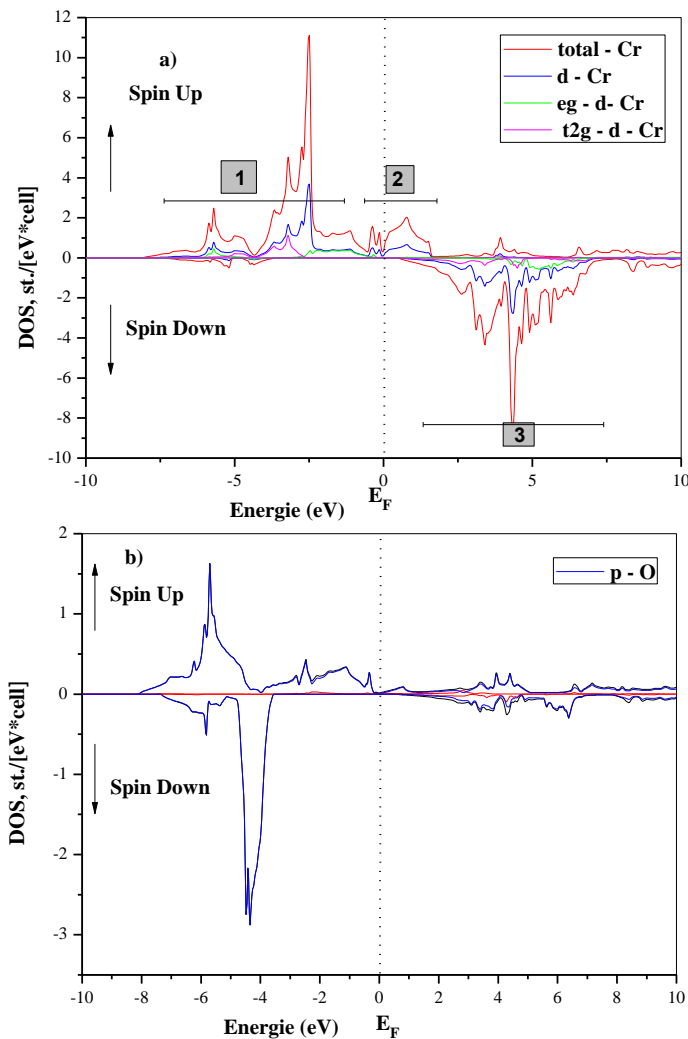


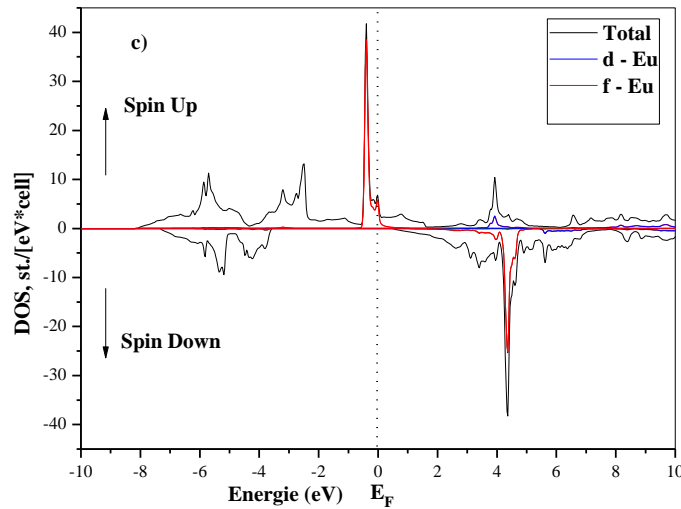
Figures III.10 : Les DOS des spins up et spins down de $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$

Dans la figure III.11, On a tracé la DOS pour le composé EuO dopé avec une concentration de 0.75 de chrome.

La situation de la densité d'état de ce composé est la suivante :

- Les états 3d-Cr contribue dans la région 1 plus une hybridation avec les états p-O (figure III.11.a et b). Dans les spins minoritaire pour la BV et entre une gamme d'énergie $[-4.15\text{eV}, -7.8\text{eV}]$ seulement les états p-O qui forme le DOS total un pic de valeur -2.86eV est observé pour l'atome de l'oxygène.
- La zone 2 est localisé au niveau de fermi formé généralement par l'atome Cr. L'origine de magnétisme pour ce composé due a l'atome de chrome.
- Une lacune d'énergie au niveau de spin dn donne un comportement demi-métallique pour ce composé.
- La situation de la troisième région est un mélange entre les orbitales d-Cr et f-Eu qui provoque une forte hybridation, cette hybridation est traduite par un moment magnétique considérable





Figures III.11 : Les DOS des spins majoritaires (up) et spins minoritaires (dn) de $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$

III.4 Propriétés magnétiques des matériaux $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$:

Dans cette partie, on présente et on discute les propriétés magnétiques des composés $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$. La meilleure façon d'étudier ces propriétés 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.

III.4.1 Moments magnétiques :

Le moment magnétique de spin est défini par la différence entre le nombre d'occupation total des orbitales de spins majoritaires et nombre d'occupation total des orbitales de spins minoritaires, respectivement. **Le tableau III.3** regroupe les résultats obtenus pour le moment magnétique total et partiels des atomes Cr, Eu, O qui constitue les composés $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$.

Les moments magnétiques de l'atome Cr sont $3.828, 3.682$ et $6.478\mu_B$ respectivement pour les composés $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$. On remarque que les moments magnétiques totaux sont due l'atome magnétique (Cr) de Cr est inférieure par rapport aux M (total).

Les moments magnétiques des atomes chrome (Cr) et l'oxygène (O) pour les trois concentrations sont parallèles, c à d que les bandes de valence interagissent de manière ferromagnétique avec les spins magnétiques de Cr. Les moments magnétiques des atomes Eu

et Cr pour les concentrations ($x=0.5, 0.75$) décrivent l'interaction ferromagnétique entre les spins d'Eu et Cr.

Le tableau III.3 : Les moments magnétiques total et partiels des atomes Cr, Eu, O qui constitue les composés $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$, et l'énergie E_{HM} et E_{HFM} .

	M(Total)	M(Eu)	M(Cr)	M(O)	E_{HM}	E_{HFM}
Eu_{0.75}Cr_{0.25}O	25.00/4.125	6.612	3.828	-0.08	0.494	3.802
Eu_{0.5}Cr_{0.5}O	11.00	6.513	3.682	-0.107	0.007	2.948
(P4/mmm)						
Eu_{0.25}Cr_{0.75}O	19.00	6.478	3.57	0.06	0.195	3.778

III.4.2 Interaction d'échanges :

L'échange entre les moments locaux de Cr et les porteurs produits joue un rôle clé dans la physique des DMSs. En fait, c'est cet échange qui permet aux porteurs de transporter le ferromagnétisme entre les moments dilués.

L'échange est caractérisé par deux constantes : l'échange s-d $N_0\alpha$ et l'échange p-d $N_0\beta$. Nous avons calculé les constantes d'échange en évaluant le splitting de spin des bandes de conduction et de valence [12]. L'idée fondamentale provient de la théorie du champ moyen [13-14], basée sur l'hamiltonien donné par l'équation suivante :

$$H = N_0\beta sS$$

N_0 désigne la concentration de cations, β est l'intégrale d'échange p-d. s et S sont le spin de trou et le spin de Cr, respectivement.

Par conséquent, les constantes d'échange peuvent être calculées directement à partir du splitting de spin de pointe de la bande de valence et de conduction ($\Delta E_c = E_c^\downarrow - E_c^\uparrow$), ($\Delta E_v = E_v^\downarrow - E_v^\uparrow$) selon les expressions suivantes [15,16] :

$$N_0\alpha = \frac{\Delta E_c}{x\langle s \rangle}$$

$$N_0\beta = \frac{\Delta E_v}{x\langle s \rangle}$$

Où x est la concentration de Cr et $\langle s \rangle$ est la moitié de l'aimantation calculée par ion de Cr.

Les résultats des constantes d'échanges $N_0\alpha$ et $N_0\beta$ sont présentés dans le tableau III.4

Tableau III.4 : Les constantes d'échanges des composés $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$ et $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$.

	$\Delta E_C = E_C^\downarrow - E_C^\uparrow$	$\Delta E_V = E_V^\downarrow - E_V^\uparrow$	$N_0\alpha$	$N_0\beta$
$x = 0.25$	0.36103	-3.33252	0.75450	-6.96451
$x = 0.5$	0.27857	-3.15727	0.30262	-3.42995
$x = 0.75$	0.20848	-3.40196	0.08582	-1.40041

Le spitting en spin des BV et BC sont montrés dans les figures qui donnent la densité d'état de notre matériau.

La détermination des couplages d'échanges se fait par une approche de négliger les états localisés autour des impuretés de chrome, la substitution des cations de europium par chrome dans une super cellule de type cubique permet de créer une interaction de type sp-d

Le calcul des constants d'échanges $N_0\alpha$ et $N_0\beta$ par l'approche GGA+U (U= 4.9eV) est présenté sur le tableau III.4. La valeur positive de $N_0\alpha$ de notre matériau représente un ordre ferromagnétique entre les spins des ions magnétiques et les électrons de BC par contre la valeur négative de $N_0\beta$ représente une interaction antiferromagnétique entre les états 3d de Cr et les électrons de BV.


D'après les résultats obtenus dans le tableau III.4 on remarque que l'interaction d'échange de type ferromagnétique diminue lorsque on augmente l'impureté magnétique par contre l'interaction de type ferromagnétique diminue en valeur absolue. Nous constatons ici qu'il n'existe pas des valeurs expérimentales ou théoriques pour faire une comparaison avec nos valeurs.

D'après les diagrammes des densités d'état de composé $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$ un pic de Dirac est apparu par l'impureté magnétique qui représente un état localisé de caractère 3d-Cr. Le spitting ΔE_V est un spitting en spin de BV entre les états de caractère p de spin dn et de spin up correspondant à un échange apparent ferromagnétique (positif) et de spitting entre BV de spin dn et l'état localisé de spin up correspond à un échange frottement antiferromagnétique.

Notre résultat trouvé confirme la caractéristique magnétique des composés $\text{Eu}_{x-1}\text{Cr}_x\text{O}$.

References:

- [1] Hohenberg P, Kohn W. Phys. Rev. 136, B864-871 (1964)
- [2] Kohn W, Sham L.J. Phys. Rev. 140, A1133-1138 (1965)
- [3] J.C. Slater, Adv. Quant. Chem. 1 (1994) 5564
- [4] Blaha P, Schwarz K, Madsen G.K.H, Kvasnicka D, Luitz J: WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. Karlheinz Schwarz, Techn. Universitaet Wien, Wien, Austria (2001)
- [5] Murnaghan F.D.proc.Natl.Acad.Sci.Usa 30,5390(1944)
- [6] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390
- [7] G. K. Sokolova, K. M. Demchuk, K. P. Rodionov, and A. A. Samokhvalov, soviet Physics JETP volume 22, number 2 february, 1966
- [8] H. A. Eick, N. C. Baenzigern D L. Eyring, Contribution from the department of chemistry of the state university of iowa vol. 78 oct. 20, 1956
- [9] Rowaida Fakhri Mohammad Dewaikat, Thesis « High-Pressure Band Structure and Structural Stability of EuTe and EuO Compounds” Faculty of Graduate Studies, An-Najah National University, Palestine
- [10] Jayaraman, A Singh, A K. Chatterjee, A and Usha Devi, S. Phys. Rev. B 9. 1974; (6): 2513–2520
- [11] P.Y.Yu et M.Cardona, "Fundamentals of Semiconductors"(New York: Springer, 2010)
- [12] J Szezytko, W Mac, A Twardowski, F Mastsukura, H Ohono, Phys. Rev. B, 59 (1999) 12935
- [13] S Savinto, P Ordejon, N A. Hill, Phys. Rev. B, 63 (2001) 165206
- [14] J. A Gaj, R Planel, G Fislman. Solis. State. Commun, 29 (1984) 861
- [15] Sanvito, S, Ordejon, P, Hill, N.A.: Phys. Rev. B 63, 165206 (2001)
- [16] Raebiger, H, Ayuela, A, Nieminen, R.M. J. Phys. Condens. Matter 16, L457 (2004)

The background of the slide is white and decorated with several black graduation caps (mortarboards) and scattered gold confetti. The caps are positioned at various angles, some showing the top and others showing the side with the tassel. The confetti consists of small, curly gold streamers.

Conclusion
Conclusion

Conclusion Générale :

La physique est une science très vaste, qui laisse libre court à l'imagination de l'homme, néanmoins on a réussi à scruter pas mal de propriétés physiques pour un très grand nombre de matériaux et composés, par le biais de différentes approches et théories. Pour définir n'importe quel système physique à N corps, nous sommes confrontés à résoudre l'équation de Schrödinger, qui résume la totalité des différentes interactions physiques de ce système.

Ainsi la meilleure approche utilisée par les physiciens pour résoudre une telle situation est la DFT, qui est une méthode ab-initio, fondée sur les principes de base de la mécanique quantique, et qui s'est révélée fiable et efficace.

Dans ce mémoire, nous avons effectué nos calculs, concernant nos composés $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ ($x=0.25, 0.5$ et 0.75), dans le cadre de cette théorie on a visé à comprendre les propriétés structurales, magnétiques et électroniques de ces composés en utilisant la méthode des ondes planes augmentées à potentiel complet plus les orbitales localisées (FP-LAPW + Lo), implantée dans le code Wien2K, où le potentiel d'échange et corrélation a été traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBEsol) plus l'effet de potentiel coulombienne U. Pour les propriétés structurales, les valeurs calculées sont les paramètres de réseau d'équilibre, les modules de compressibilité et leurs premières dérivées et ils sont en bon accord avec les résultats trouvés à littérature.

Les structures électroniques des matériaux $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ montrent un comportement demi-métallique pour les trois concentrations. Ainsi, le caractère demi-métallique est confirmé par les structures électroniques et un magnéton de Bohr entier de magnétisation totale, tandis que l'état fondamental ferromagnétique de ces composés est stable par mécanisme à double échange.

L'état fondamental ferromagnétique est stabilisé par le mécanisme double échange lorsque les états $3d-t_{2g}$ (Cr) sont partiellement occupés.

La densité d'états donne une explication détaillée sur la contribution des atomes pour des différentes orbitales dans la structure électronique. On a fait une estimation de la polarisation en spin pour chaque composé ; les résultats donnent une polarisation complète (de 100%).

Les propriétés magnétiques sont estimées en raison de calcul des moments magnétiques locaux de chaque atome ainsi que le moment magnétique total pour chaque composé.

L'entier de magnéton de Bohr confirme la caractéristique demi-métallique de ces composés. Nous concluons que la différence de l'alignement de spin entre le spin majoritaire et le spin minoritaire états contribue au ferromagnétisme dans $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ systèmes.

On remarque que la constante d'échange $N_{0\beta}$ est négative, alors que la constante d'échange $N_{0\alpha}$ est positive pour toutes les concentrations. Ceci révèle le couplage d'échange antiferromagnétique entre BV et 3d-Cr et le couplage d'échange ferromagnétique entre BC et 3d-Cr. Nos résultats prouvent la caractéristique magnétique des composés $\text{Eu}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}$ à l'étude.

À partir de ces résultats, il est évident que les composés $\text{Eu}_{0.25}\text{Cr}_{0.75}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}$, $\text{Eu}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{O}$ étudiés sont des très bons candidats pour les futures applications dans les domaines de la spintronique et de la magnéto-optique.

<تأثير الشوائب المغناطيسية على الخواص الإلكترونية والمغناطيسية لأكسيد اليوروبيوم>

الملخص

يتمثل عملنا في دراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية والمغناطيسية لأكسيد اليوروبيوم (EuO) المطعم بشوائب الكروم (Cr) ، باستخدام طريقة الموجات المستوية المتزايدة عند الإمكانيات الكاملة بالإضافة إلى المدارات المحلية (FP-LAPW + Lo) ، المنفذة في برنامج Wien2K ، حيث تمت معالجة جهد التبادل والارتباط من خلال تقريب التدرج المعمم (GGA-PBEsol) إضافة إلى جهد التبادل كولوم U، ضمن النظرية الوظيفية للكثافة (DFT). تتوافق الخصائص الهيكلية وهي معامل الشبكة ومعامل الانضغاط ومشتقاته بشكل جيد مع النتائج المتاحة سلفاً. يكشف تحليل هياكل النطاق وكثافة الحالات (DOS) وتفاعلات التبادل والعزوم المغناطيسية أن جميع العناصر المكونة من $OEu_{0.75}Cr_{0.25}$ و $OEu_{0.5}Cr_{0.5}$ و $OEu_{0.25}Cr_{0.75}$ يمكن أن تقدم طابعاً نصف معدني مغناطيسياً حديدياً.

الكلمات المفتاحية DFT, النصف معدنية الفيرومغناطيسية هياكل النطاق كثافة الحالات

<L'effet des impuretés magnétiques sur les propriétés électroniques et magnétiques de l'Oxyde d'Europium>

Résumé :

Notre travail consiste à étudier les propriétés structurales, électroniques et magnétiques du oxyde de l'euporium (EuO) dopé au impuretés de chrome (Cr), en utilisant la méthode des ondes planes augmentées à potentiel complet plus les orbitales localisés (FP-LAPW + Lo), implantée dans le code Wien2K, où le potentiel d'échange et corrélation a été traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBEsol) plus le Potentiel d'interaction de Coulomb (U), au sein de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT). Les propriétés structurales à savoir le paramètre de maille, le module de compressibilité et sa dérivée sont en bon accord avec les résultats trouvés à littératures. L'analyse des structures de bandes, densité d'états(DOS), les interactions d'échange et de moments magnétiques révèle que les tous composées $Eu_{0.75}Cr_{0.25}O$, $Eu_{0.5}Cr_{0.5}O$ et $Eu_{0.25}Cr_{0.75}O$ peuvent présenter un caractère demi-métallique ferromagnétique.

Mot clé : DFT, demi-métallique ferromagnétique, structures de bandes, densité d'états(DOS), Wien2K.

<The effect of magnetic impurities on the electronic and magnetic properties of Europium Oxide>

Abstract:

Our work consists in studying the structural, electronic and magnetic properties of europium oxide (EuO) doped with chromium (Cr) impurities, using the method of plane waves increased at full potential plus localized orbitals (FP-LAPW + Lo), implemented in the Wien2K code, where the exchange and correlation potential has been treated by the generalized gradient approximation (GGA-PBEsol) in addition the Coulomb interaction potential (U), within the functional theory of density (DFT). The structural properties namely the lattice parameter, the bulk modulus and its derivative are in good agreement with the available results found at literatures. The Analysis of band structures, density of states (DOS), exchange interactions and magnetic moments reveals that the all composed $Eu_{0.75}Cr_{0.25}O$, $Eu_{0.5}Cr_{0.5}O$ and $Eu_{0.25}Cr_{0.75}O$ can present a ferromagnetic half-metallic character.

Key words: DFT, half-metallic ferromagnetic, band structures, density of states (DOS), Wien2K.