

## Séminaire de Chimie Théorique

Salle Auguste Laurent, UFR de Chimie, Bat. A11  
Jeudi 17 Février 2011 à 11:00

---

**Dr. Adrien SAVOYANT**

Groupe Chimie Théorique, ISM, U. Bordeaux1/CNRS

---

### **Anisotropie magnétique des semi-conducteurs II-VI dopés au manganèse**

Ce travail est une étude théorique de l'anisotropie magnétique (ionique et d'échange) des semi-conducteurs magnétique dilués (DMS) dopés au manganèse, des matériaux pour l'électronique de spin. Nous avons passé en revue les différentes approches (numériques et analytiques) utilisées par le passé dans le calcul de l'anisotropie des ions S de transition ( $\text{Cr}^+$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ) puis avons mis au point un modèle microscopique réaliste d'ion S dans un semi-conducteur II-VI et prenant en compte les interactions électrostatiques des électrons 3d avec l'ensemble du cristal, l'hybridation de ces électrons avec les anions premiers voisins, l'interaction spin-orbite et la répulsion coulombienne dans la couche 3d. Un hamiltonien pour les impuretés magnétiques  $\text{Mn}^{2+}$  a ainsi été établi et ses valeurs propres ont été calculées exactement par un code numérique Fortran 95 et de manière approchée (pour les plus basses) par théorie des perturbations à l'ordre 4. Notre modèle a ensuite été appliqué au cas des trois DMS II-VI dopés au manganèse de structure wurtzite ( $\text{ZnO}$ ,  $\text{CdS}$ ,  $\text{CdSe}$ ):Mn. Les résultats sont en bon accord avec les mesures RPE d'anisotropie ionique et une corrélation hybridation/déformation est suggérée.

Dans une deuxième partie, nous nous intéressons au calcul des constantes de superéchange antiferromagnétiques entre ions magnétique dans ces matériaux. Un calcul perturbatif à l'ordre 4 a permis d'obtenir ces constantes pour des paires d'ions  $\text{Mn}^{2+}$  premiers voisins dans les DMS II-VI. Les résultats sont en très bon accord avec les mesures de marches d'aimantation et de diffusion inélastique de neutrons. Nous avons ainsi pu expliquer l'observation de deux constantes d'échange premiers voisins dans les DMS de structure wurtzite par un processus d'échange bouclé ferromagnétique présent uniquement dans les paires hors plan hexagonal.

Contact : [p.larregaray@ism.u-bordeaux1.fr](mailto:p.larregaray@ism.u-bordeaux1.fr)