



(12) FASCICULE DE BREVET

- (11) N° de publication : **MA 34111 B1** (51) Cl. internationale : **H01L 29/82; H01L 21/00**
- (43) Date de publication : **03.04.2013**

-
- (21) N° Dépôt : **33982**
- (22) Date de Dépôt : **30.06.2011**
- (71) Demandeur(s) : **MOROCCAN FOUNDATION FOR ADVANCED SCIENCE, INNOVATION & RESEARCH (MASCIR), TECHNOLIS RABATSHORE , 303 BUSINESS CENTER RABAT-SALE 11000 (MA)**
- (72) Inventeur(s) : **abdellilah BENYOUSSEF ; MOHAMED HAMDOUN ; MOHAMED BELAICHE ; OMAR MOUNKACHI**
- (74) Mandataire : **MOHAMED EL AMRANI**

-
- (54) Titre : **CONCEPT D'INTEGRATION DU FERROMAGNETISME, DU FERRIMAGNETISME ET DE LA DEMI-METALICITE DANS DES NANOSTRUCTURES CODOPES ET TRIDOPES DE SNO2 NANOSTRUCTURES DE METAUX DE TRANSITION COMME LE COBALT, LE MANGANESE ET LE FER.**
- (57) Abrégé : **DES SEMI-CONDUCTEURS MAGNÉTIQUES (FERROMAGNÉTIQUE ET FERRIMAGNÉTIQUE), DEMI-MÉTALLIQUES (NANOSTRUCTURES ET MASSIFS) ET ISOLANTS SONT FOURNIS. LES SEMI-CONDUCTEURS MAGNÉTIQUES CONSISTE EN UN DIOXYDE D'ÉTAIN CO-DOPÉ ET TRI-DOPÉ. CE COMPOSÉ SE TROUVE DANS LA PHASE FERROMAGNÉTIQUE ET FERRIMAGNÉTIQUE INTRINSÈQUE. LA TEMPÉRATURE DE TRANSITION ET LE COMPORTEMENT FERROMAGNÉTIQUE OU FERRIMAGNÉTIQUES SONT OPTIMISÉS PAR UN CHOIX CONVENABLE DE LA CONCENTRATION ET DU TYPE DES IONS MAGNÉTIQUES DU DOPAGE, CO-DOPAGE ET TRI-DOPAGE.**

Résumé:

Des Semi-conducteurs magnétiques (ferromagnétique et ferrimagnétique), demi-métalliques (nanostructures et massifs) et isolants sont fournis. Les semi-conducteurs magnétiques consiste en un dioxyde d'étain co-dopé et tri-dopé. Ce composé se trouve dans la phase ferromagnétique et ferrimagnétique intrinsèque. La température de transition et le comportement ferromagnétique ou ferrimagnétiques sont optimisés par un choix convenable de la concentration et du type des ions magnétiques du dopage, co-dopage et tri-dopage.

01 AVR 2013

Description :**Domaine de l'invention:**

Les matériaux utilisés pour des composants électroniques qui utilisent les propriétés ferromagnétiques, ferrimagnétiques, demi-métalliques et isolantes dans leurs fonctions.

Description de l'état de l'art:

Les oxydes magnétiques dilués (DMOs) ont reçu un intérêt très important dans le domaine de la spintronique pour leurs propriétés physiques importantes (polarisation de spin au niveau de Fermi, l'intégration facile dans les dispositifs semi-conducteurs et d'autres propriétés). Les oxydes dopés par un matériau de transition sont les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMSs) les plus étudiés. Ils ont des propriétés magnéto-optique très intéressantes, de grand progrès dans ce sens ont été fait, mais peu de résultats sur des propriétés ferromagnétique ou ferrimagnétique a température ambiante dans des hétéro-structures a base d'oxydes dopés ont été réalisés.

Les demi-métaux ferromagnétiques sont des systèmes prometteurs avec une combinaison de propriétés recherchées, c'est à dire les systèmes ferromagnétiques, où le canal d'un spin est métallique alors que l'autre est semi-conducteur. Un problème important pour l'utilisation pratique du transport de spin dans les semi-conducteurs est la fabrication de matériaux qui rendent possible l'injection d'électrons dans un semiconducteur polarisé en spin à la température ambiante [1]. La demi-métallicité conduit à une polarisation de spin de 100% des états électroniques au niveau de Fermi E_f [2,3].

Le ferromagnétisme demi-métallique a été découvert par Groot dans le semi-Heusler NiMnSb [4], et dans une pérovskite de manganèse [5]. Depuis d'autres

semi-métaux ont été trouvés. Parmi cela on cite les oxydes magnétiques binaires CrO_2 et Fe_3O_4 , les matériaux à magnétorésistance géante ($\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$, et $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$) [6], les semi-conducteurs magnétiques dilués ($\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$), et les composés zinc-blende MnAs et CrAs [7–9].

Des efforts considérables ont été déployés pour utiliser cette propriété pour réaliser une électronique basée sur le spin [10, 11]. Les oxydes magnétiques dilués (ZnO , SnO_2 and TiO_2) sont de bons candidats pour des électrodes dans les jonctions magnétiques tunnel. Cependant, leur polarisation de spin n'atteint pas 100% et la température de transition est au dessous de la température de transition. En plus, la polarisation de spin décroît avec l'augmentation de la température, et elle est en général faible à la température ambiante.

La première jonction fabriquée à base de DMS est basée sur $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$ avec un taux élevé de magnétorésistance tunnel TMR à 4K [12], cependant ce taux décroît brutalement à une assez basse température $<30\text{K}$ à cause de la faible température de transition $T_c = 170\text{K}$ trouvée pour ce système [1,13,14]. Il existe clairement un besoin d'un DMS avec un grand T_c afin d'améliorer le fonctionnement des jonctions magnétique tunnel à température ambiante. Notre objectif d'améliorer la température de transition et la polarisation de spin dans les DMSs, en optimisant le choix du type de dopage, co-dopage et tri-dopage dans SnO_2 et d'essayer d'expliquer les propriétés physique observées expérimentalement par la structure électronique en utilisant un code calculs de structures électronique basé sur la méthode KKR-CPA (Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) approximation du potentiel cohérent (CPA)) pour montrer et confirmer les propriétés physique intrinsèques observées expérimentalement.

Description de l'invention:

L'invention est basée sur le concept d'intégrer les propriétés ferromagnétiques, ferrimagnétiques, demi-métalliques et isolantes dans SnO₂ co-dopés et tri-dopés par des métaux de transition sous forme de nanostructures et massifs. Ces matériaux sont opérationnels dans un large domaine de température (-55°C à 125°C). Cette application montre que le dioxyde d'étain dilué (co-dopé et tri-dopé) peut donner lieu au comportement ferromagnétique et ferrimagnétique demi-métallique ou bien isolant basé sur un couplage magnétique fort entre les impuretés magnétiques dans SnO₂. Cette invention décrit le mécanisme de dopage dans SnO₂ par le Cobalt, le Manganèse et le Fer. Nous donnons les résultats de quelques matériaux ; par exemple SnO₂ dopé par le cobalt et le manganèse dans la phase ferrimagnétique, SnO₂ dopé par le fer et le manganèse dans la phase ferrimagnétique, SnO₂ dopé par le fer et le cobalt dans la phase ferrimagnétique, et le SnO₂ dopé par le cobalt, le manganèse et le fer dans la phase ferromagnétique.

Cette invention montre, par un design expérimental, que les systèmes Sn_{1-x}(Co, Mn)_xO₂, Sn_{1-x}(Co, Fe)_xO₂, Sn_{1-x}(Fe, Mn)_xO₂ ont un comportement ferrimagnétiques a haute température avec un moment de saturation et un champ coercitive très important et modéré dépendant du type, de concentration de l'élément magnétique de dopage et co-dopage dans SnO₂ et de la température de calcination (taille des particules).

Cette invention montre, par un design expérimental, que les systèmes Sn_{1-x}(Co, Mn, Fe)_xO₂, ont un comportement ferromagnétique a haute température avec un moment de saturation et champ coercitive importants.

Cette invention montre, par un design numérique, que $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Mn})_x\text{O}_2$, $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Fe})_x\text{O}_2$, $\text{Sn}_{1-x}(\text{Fe}, \text{Mn})_x\text{O}_2$ est un semi-conducteur demi-métallique ferrimagnétique avec une polarisation 100% au niveau de Fermi E_f .

Cette invention montre, par un design numérique que, $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Mn}, \text{Fe})_x\text{O}_2$ est un semi-conducteur demi-métallique ferromagnétique avec une polarisation 100% au niveau de Fermi E_f .

Notre invention montre le succès de la fabrication des demi-métaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques sur un large domaine de température pour des matériaux massifs et des nanostructures. Les nanostructures peuvent être créés par exemple par la méthode de co-précipitation, sol-gel, MBE (Molecular Beam Epitaxy), PLD (pulsed laser deposition), MOCVD (Metal organic Chemical Vapor Deposition) et la pulvérisation cathodique (sputtering).

La structure cristalline est caractérisée par les rayons X et les propriétés magnétiques par le SQUID. Ces résultats montrent que le SnO_2 dopé est un réseau cristallin rutile sans phases secondaires et que les phases ferromagnétiques et ferrimagnétiques sont intrinsèques. D'un autre côté ces propriétés magnétiques et les propriétés demi-métalliques ont été montrées par les calculs des structures électroniques par deux types de calculs LDA (approximation de densité locale) et LDA-SIC.

L'origine du magnétisme dans ces alliages est un sujet de recherche ouvert. Il a été proposé que l'interaction d'échange entre les spins des dopants se fasse à travers les trous ou les électrons. Dans l'état ferrimagnétique il ya un couplage antiferromagnétique entre les ions dopants Co et Mn pour le cas $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Mn})_x\text{O}_2$ et entre Co et Fe pour le cas $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Fe})_x\text{O}_2$ et Mn et Fe pour le cas

$\text{Sn}_{1-x}(\text{Fe}, \text{Mn})_x\text{O}_2$, tandis que les ions de Fe stabilise l'ordre ferromagnétique entre les ions de Co et de Mn pour le cas de $\text{Sn}_{1-x}(\text{Co}, \text{Mn}, \text{Fe})_x\text{O}_2$.

Les matériaux ont été élaborés par la méthode de co-précipitation chimique en utilisant le chlorure d'étain $\text{SnCl}_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, le chlorure de fer, l'acétate de cobalt $\text{C}_4\text{H}_6\text{CoO}_4$ et l'acétate de manganèse ($\text{Mn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4(\text{H}_2\text{O})$) comme sources de Sn, Fe, Mn et Co, respectivement. Les précurseurs ont été ajoutés et mélangés avec l'éthanol de façon homogène et reflux sous atmosphère d'air pour un mélange uniforme des précurseurs à 60°C , quelques gouttes de HCl ont été ajoutés pour assurer la dissolution. La précipitation a été obtenue par l'utilisation d'une solution aqueuse de NaOH, les réactifs ont été agité constamment par un agitateur magnétique jusqu'à ce que le PH dépasse 7. Le taux de chute doit être bien contrôlé pour l'homogénéité chimique. Les précipités ont été lavés plusieurs fois pour éliminer les impuretés solubles dans l'eau et les réactifs libres, puis séché à 110°C pendant 10h. Le contenu spongieux a été filtré, séché puis mis sous forme de poudre. Les échantillons sous forme de pastilles pressées contenues dans une nacelle en alumine ont été frittés à différentes températures dans un four pendant une durée variable dans l'air.

L'analyse de ces matériaux et nanomatériaux ont été faite par XRD (X-ray Diffraction) avec une radiation $\text{Cu } \alpha$ des échantillons préparés par la méthode de co-précipitation.

La figure 1 donne le spectre des Rayons X des nanoparticules $\text{Sn}_{0.95}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$, les pics correspondent à la phase rutile formée après calcination à 600°C .

La figure 2 donne le spectre des Rayons X des nanoparticules $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, les pics correspondent à la phase rutile formée après calcination à 800°C .

La figure 3 donne le spectre des Rayons X pour les nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$, les pics correspondent à la phase rutile formée après calcination à 800°C .

La figure 4 donne le spectre des Rayons X du matériau massif $\text{Sn}_{0.9-y}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_y\text{O}_2$ pour $y=0$ et $y=0.01$. Tous les pics correspondant à la structure rutile formée après calcination à 1000°C sont présents. Il n'y a pas de phase secondaire dans le spectre des rayons X, ainsi l'ordre magnétique observé est intrinsèque, il n'est dû à aucune autre phase magnétique.

La structure rutile de SnO_2 , nanostructuré ou massif, n'a pas changé avec le dopage, co-dopage et tri-dopage. Il n'y a pas de phase secondaire dans le spectre des rayons X, ainsi l'ordre magnétique observé est intrinsèque, il n'est dû à aucune autre phase magnétique.

Le tableau 1 montre la taille des nanoparticules, le pas du réseau cristallin et le volume de la cellule unitaire de $\text{Sn}_{0.95}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$. La taille des nanostructures et le volume de la cellule décroissent avec la croissance de la concentration du fer dans le cas de $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, alors que dans le cas de $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ les tailles sont les mêmes.

Le tableau 2 montre que le pas du réseau cristallin et le volume de la cellule unitaire décroissent faiblement lorsque les concentrations de Mn, Co et Fe croissent pour le cas massif du système $\text{Sn}_{0.9-y}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_y\text{O}_2$ (pour $y=0$ et $y=0.01$).

La figure 5 montre le cycle d'hystérésis des nanostructures $\text{Sn}_{0.95}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$ à différentes températures. Le moment de saturation est de l'ordre de 0.023 emu/g à température ambiante.

Le tableau 6 montre la décroissance de l'aimantation de saturation et rémanente et du champ coercitif lorsque la température augmente.

La figure 6 donne la variation de l'aimantation en fonction du champ magnétique à différentes températures du matériau massif $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ par le SQUID. Nous obtenons un cycle d'hystérésis bien clair. Ainsi le couplage ferromagnétique est introduit par le dopage par Mn et Co. En plus, l'aimantation rémanente et de saturation croient considérablement lorsque la température décroît. Ceci montre que le couplage ferromagnétique est renforcé lorsqu'on baisse la température de $T=180\text{K}$ à 20K . L'aimantation de saturation de $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ n'est pas complètement atteinte à un champ magnétique appliqué de 50 kOe. Le champ coercitif décroît lorsque la température croît (**Figure 7**).

La figure 8 montre le cycle d'hystérésis du matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à différentes températures.

Le tableau 3 montre la décroissance de l'aimantation de saturation et rémanente et du champ coercitif lorsque la température augmente. En plus, le dopage avec le fer fait croître l'aimantation de saturation et le champ nécessaire pour l'atteindre [15, 16].

La figure 9 montre le cycle d'hystérésis des nanostructures $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ à différentes températures. Le moment de saturation est de l'ordre de $0.043 \mu_B$ à basse température (5K).

Le tableau 4 montre la décroissance de l'aimantation de saturation et rémanente et du champ coercitif lorsque la température augmente.

La figure 10 montre le cycle d'hystérésis des nanostructures $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à différentes températures.

Le tableau 5 montre que l'aimantation de saturation et rémanente et le champ coercitif sont plus faibles que ceux du matériau massif ($\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$) et que ceux des nanostructures co-dopées ($\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$).

La figure 11 montre le cycle d'hystérésis de la nanostructure $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$, à basse température le champ coercitif est plus grand que dans les autres nanostructures.

La figure 12 donne la variation de l'aimantation en fonction du champ magnétique à différentes températures de la nanostructure $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$. Ce système a un moment de saturation plus grand que les autres nanostructures.

La figure 13 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température pour la nanostructure $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ sous un champ magnétique appliqué de 500 Oe, ce résultat montre que ce système est magnétique pour une gamme de températures de $5\text{k} < T < 300\text{K}$.

La figure 14 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température pour la nanostructure $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$ sous un champ magnétique appliqué de 500 Oe, ce résultat montre que ce système est magnétique pour une gamme de températures de $5\text{k} < T < 350\text{K}$.

La figure 15 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ pour différentes valeurs du champ appliqué (500 Oe, 1000 Oe et 10000 Oe), ce résultat montre que ce système est magnétique dans une large gamme de température, $5\text{k} < T < 200\text{K}$.

La figure 16 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ pour une valeur du champ appliqué de 500 Oe, ce résultat montre que ce système est magnétique dans une large gamme de température, $5\text{k} < T < 250\text{K}$

La figure 17 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température de la nanostructure $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{O}_2$ avec le processus ZFC et FC pour une valeur du champ appliqué de 500 Oe, ce résultat montre que ce système est magnétique dans une large gamme de température, $5\text{k} < T < 170\text{K}$, avec une température de blocage $T_B = 160\text{K}$.

La figure 18 donne la variation de l'aimantation en fonction de la température de la nanostructure $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ avec le processus ZFC et FC pour une valeur du champ appliqué de 500 Oe, ce résultat montre que ce système est magnétique dans une large gamme de température, $5\text{k} < T < 190\text{K}$, avec une température de blocage $T_B = 180\text{K}$.

La figure 19 donne la valeur de l'inverse de la susceptibilité du système $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ massif à 10kOe, et la valeur de la constante de curie expérimentale $C = 15.5 \cdot 10^{-4}$ et la température asymptotique $T = -90\text{k}$ ainsi que la valeur du moment effectif $\mu_{\text{eff}} = 2.828 \sqrt{C \cdot A} = 1.34 \mu_B$.

La figure 20 donne la valeur de l'inverse de la susceptibilité du système $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ massif à 10 kOe, et la valeur de la constante de curie

expérimentale $C=1.73 \cdot 10^{-4}$ et la température asymptotique $T=240\text{k}$ ainsi que la valeur du moment effectif $\mu_{\text{eff}}=2.828\sqrt{C}.A=0.446 \mu_{\text{B}}$

La figure 21 donne la valeur de l'inverse de la susceptibilité de la nanoparticule $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à 1 kOe, la valeur de la constante de curie expérimentale $C=3.03 \times 10^{-4}$ et la température asymptotique $T=-30\text{k}$ ainsi que la valeur du moment effectif $\mu_{\text{eff}}=2.828\sqrt{C}.A=0.594 \mu_{\text{B}}$

La figure 22 donne la valeur de l'inverse de la susceptibilité de la nanoparticule $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à 10 kOe, la valeur de la constante de curie expérimentale $C=3.46 \times 10^{-5}$ et la température asymptotique $T=50\text{k}$ ainsi que la valeur du moment effectif $\mu_{\text{eff}}=2.828\sqrt{C}.A=0.20 \mu_{\text{B}}$ comparable aux résultats du calcul ab initio $\mu=0.186 \mu_{\text{B}}$

Nous fixons dans nos calculs ab-initio les constantes de la maille à ceux du cristal SnO_2 sans dopage, avec dopage, co-dopage et tri-dopage avec la structure Rutile trouvée expérimentalement. Le désordre joue un rôle important en DMS dû à la présence de défauts et les positions aléatoires de l'impureté dans la matrice, ainsi la méthode avec laquelle on fait le calcul de structure électronique est basée sur la méthode KKR-CPA, qui est une bonne approximation pour étudier l'effet du désordre dû à l'introduction d'impuretés dans SnO_2 . Nous avons utilisé le code MACHIKANEYAMA2002v08 produit par H. Akai de l'université d'Osaka [17], avec la paramétrisation de Vosko, Wilk et Nusair (VWN) pour l'énergie d'échange et corrélation [18] pour la méthode LDA (local density approximation). Pour l'approximation SIC on utilise la méthode pseudo-SIC [19]. La fonctionnelle utilisée prévoit un gap de 2.05 eV pour SnO_2 pour le cas LDA et 3.01eV pour le cas pseudo-SIC près de la valeur expérimentale de 3.6 eV, voir figures 23 et 24.

La figure 23 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Sn pour le système SnO_2 avec l'approximation LDA).

La figure 24 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Sn pour le système SnO_2 avec l'approximation pseudo-SIC).

La figure 25 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Fe, bleu : densité de la couche d de Mn, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferromagnétique avec l'approximation LDA, ce résultat montre que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d de Mn et d de Fe dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Mn et Fe dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 7 pour l'approximation LDA.

La figure 26 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Fe, bleu : densité de la couche d de Mn, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferrimagnétique avec l'approximation pseudo-SIC, ce résultat montre que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d du Mn et d du Fe dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Mn et Fe dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 7 par l'approximation pseudo-SIC.

Ces résultats montrent que le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ est 100% polarisé au niveau de Fermi. Cette polarisation est forte pour les deux types

d'approximation LDA et pseudo-SIC, elle vient de l'hybridation de la couche d de Mn et d de Fe dans la bande interdite de SnO_2 .

La figure 27 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, bleu : densité de la couche d de Fe, vert : densité de la couche d de Co, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferrimagnétique avec l'approximation LDA. ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi, cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d du Co et du Fe dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Mn et Fe dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 8 par l'approximation LDA.

La figure 28 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Fe, bleu : densité de la couche d de Mn, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferrimagnétique avec l'approximation pseudo-SIC, ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d du Co et d du Fe dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Co et Fe dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 8 pour l'approximation pseudo-SIC.

Ces résultats montrent que le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est 100% polarisé au niveau de Fermi. Cette polarisation est forte pour les deux types d'approximation LDA et pseudo-SIC, elle vient de la hybridation de la couche d du Co et d du Fe dans la bande interdite de SnO_2 .

La figure 29 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, bleu : densité de la couche d de Mn, vert : densité de la couche d

de Mn, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferrimagnétique avec l'approximation LDA, ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi, cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d du Co et d du Mn dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Mn et Co dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 9 pour l'approximation LDA.

La figure 30 donne la densité d'état (noir : densité total ; rouge : densité de la couche p de O, vert : densité de la couche d de Mn, bleu : densité de la couche d de Co, pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ pour le cas Ferrimagnétique avec l'approximation pseudo-SIC, ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi, cette polarisation vient de la hybridation de la couche d du Co et du Mn dans la bande interdite de SnO_2 , ce type d'interaction magnétique entre Co et Mn dans $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 9 pour l'approximation pseudo-SIC.

Ces résultats montrent que le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ est 100% polarisé au niveau de Fermi cette polarisation est forte pour les deux type d'approximation LDA et pseudo-SIC, elle vient de l'hybridation de la couche d du Co et d du Mn dans la bande interdite de SnO_2 .

La figure 31 donne la densité d'état pour le système $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ (noir : densité total ; rouge : densité de la couche d de Co, vert : densité de la couche d de Mn, bleu : densité de la couche d de Fe) pour le cas Ferromagnétique. Ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d du Co et d du Fe dans la bande interdite de SnO_2 ce type d'interaction magnétique entre Mn, Co et Fe dans $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.03}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 10 par l'approximation LDA.

La figure 32 donne la densité d'état pour le système $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ (noir : densité total ; rouge : densité de la couche d de Co, vert : densité de la couche d de Mn, bleu : densité de la couche d de Fe) pour le cas Ferromagnétique. Ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi, cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d de Mn, Co et de Fe dans la bande interdite de SnO_2 . Ce type d'interaction magnétique entre Mn, Co et Fe dans $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ est montré dans le tableau 11 pour l'approximation LDA.

La figure 33 donne la densité d'état pour le système $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ (noir : densité total ; rouge : densité de la couche d de Mn, vert : densité de la couche d de Co) sous un champ magnétique extérieur de 500Oe pour le cas Ferrimagnétique. Ces résultats montrent que le système est 100% polarisé au niveau de Fermi sous un champ magnétique extérieur, cette polarisation vient de l'hybridation de la couche d de Mn et Co dans la bande interdite de SnO_2 .

Références :

- [1] H. Ohno, Science 281, 951(1998).
- [2] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- [3] J. de Boeck, W. van Roy, J. Das, V. Motsnyi, Z. Liu, L. Lagae, H. Boeve, K. Dessen, and G. Borghs, Semicond. Sci. Technol. 17, 342 (2002).
- [4] de Groot, R. A., Mueller, F. M., van Engen, P. G. And Buschow, K. H. J. New class of materials: half-metallic ferromagnets. Phys. Rev. Lett. 50, 2024–2027 (1983).
- [5] Park, J.-H. et al. Direct evidence for a half-metallic ferromagnet. Nature 392, 794–796 (1998).
- [6] R. J. Soulen, Jr., J. M. Byers, M. S. Osofsky, B. Nadgorny, T. Ambrose, S. F. Cheng, P. R. Broussard, C. T. Tanaka, J. Nowak, J. S. Moodera, A.

- Barry, and J. M. D. Coey, *Science* 282, 85 (1998).
- [7] A. Stroppa, S. Picozzi, A. Continenza, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* 68, 155203 (2003).
- [8] H. Akai, *Phys. Rev. Lett.* 81, 3002 (1998).
- [9] H. Akinaga, T. Manago, and M. Shirai, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 39, L1118 (2000).
- [10] Wolf, S. A. et al. *Spintronics: A spin-based electronics vision for the future.* *Science* 294, 1488–1495 (2001).
- [11] Fang, C. M., de Wijs, G. A. & de Groot, R. A. Spinpolarization in half-metals, *J. Appl. Phys.* 91, 8340–8344 (2002).
- [12] M. Tanaka and Y. Higo, *PhysRevLett.*87.026602, (2001).
- [13] S. A. Wolf *et al*, *Science* 294, 1488 (2001).
- [14] C. Gould, K. Pappert, G. Schmidt, and L. W. Molenkamp, *Adv. Mater*, 19, 323 (2007).
- [15] Z.M. Tian et al, *J. alloys and compounds* 466, 26 (2008)
- [16] A.K. Mishra et al. *Mat. Chem. and phys.* 125, 252 (2011)
- [17] H. Akai, http://www.sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/_kkri/i.
- [18] S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, *Can. J. Phys.* 58,1200 (1980).
- [19] A. Filippetti, N.A. Spaldin, *Phys. Rev. B* 67,125109, (2003).

Brève description des figures et des diagrammes:

FIG. 1 illustre le spectre de rayon- X pour les nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$;

FIG. 2 illustre le spectre de rayon- X pour les nanostructures $\text{Sn}_{0.92}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.03}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.91}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$;

FIG. 3 illustre le spectre de rayon- X pour les nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$;

FIG. 4 illustre le spectre de rayon- X pour les matériaux massifs $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$;

FIG. 5 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$ à 5K et 300K;

FIG. 6 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation du matériau massif $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ à différentes températures;

FIG. 7: Le champ coercitif en fonction de la température pour $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$

FIG. 8 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation du matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à différentes températures;

FIG. 9 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation de la nanostructure $\text{Sn}_{0.92}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ à différentes températures;

FIG. 10 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation de la nanostructure $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ à différentes températures;

FIG. 11 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation de la nanostructure $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ à basse température;

FIG. 12 illustre le cycle d'hystérésis de l'aimantation nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Fe}_{0.025}\text{O}_2$ à 5K et 100K;

FIG. 13 illustre l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_2$ sous un champ magnétique de 500 Oe;

FIG. 14 illustre l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$ sous un champ magnétique de 500 Oe;

FIG. 15 illustre l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 16 illustre l'aimantation en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 17 illustre l'aimantation en fonction de la température de la nanostructure $\text{Sn}_{0.92}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 18 illustre l'aimantation en fonction de la température pour la nanostructure $\text{Sn}_{0.91}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 19 illustre l'inverse de la susceptibilité en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 20 illustre l'inverse de la susceptibilité en fonction de la température pour le matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 21 illustre l'inverse de la susceptibilité en fonction de la température pour la nanostructure $\text{Sn}_{0.92}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, en utilisant le SQUID;

FIG. 22 illustre la température dépendance de l'inverse de la susceptibilité pour la nanostructure $\text{Sn}_{0.91}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, utilisant un SQUID;

FIG. 23 illustre la densité d'état calculée par ab initio de SnO_2 avec l'approximation LDA.

FIG. 24 illustre la densité d'état calculée par ab initio de SnO_2 avec l'approximation pseudo-SIC.

FIG. 25 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation LDA;

FIG. 26 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation pseudo-SIC;

FIG. 27 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation LDA;

FIG. 28 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation pseudo-SIC;

FIG. 29 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation LDA;

FIG. 30 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.90}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique avec l'approximation pseudo-SIC;

FIG. 31 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.91}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique;

FIG. 32 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$ montrant un comportement demi métallique ferromagnétique;

FIG. 33 illustre la densité d'état calculée par ab initio de $\text{Sn}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$ sous champ magnétique externe de 500 Oe montrant un comportement demi métallique ferrimagnétique;

Tableau 1: paramètres du réseau, volume de la cellule unitaire des nanostructures $\text{Sn}_{0.92}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$

Tableau 2: paramètres du réseau, volume de la cellule unitaire du matériau massif SnO_2 , $\text{Sn}_{0.9}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$ et $\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$.

Tableau 3: Champ coercitif mesuré, aimantation rémanente et aimantation de saturation à différentes températures du matériau massif $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$

Tableau 4: Champ coercitif mesuré, aimantation rémanente et aimantation de saturation à différentes températures nanostructures $\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.03}\text{O}_2$

Tableau 5: Champ coercitif mesuré, aimantation rémanente et aimantation de saturation à différentes températures des nanostructures $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$

Tableau 6: Champ coercitif mesuré, aimantation rémanente et aimantation de saturation à différentes températures des nanostructures $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.025}\text{Co}_{0.025}\text{O}_2$

Tableau 7: Moment magnétique partiel et total et la polarisation au niveau de Fermi pour le système $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$

Tableau 8: Moment magnétique partiel et total et la polarisation au niveau de Fermi pour le système $\text{Sn}_{0.90}\text{Fe}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$

Tableau 9: Moment magnétique partiel et total et la polarisation au niveau de Fermi pour le système $\text{Sn}_{0.90}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$

Tableau 10: Moment magnétique partiel et total et la polarisation au niveau de Fermi pour le système $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$

Tableau 11: Moment magnétique partiel et total et la polarisation au niveau de Fermi pour le système $\text{Sn}_{0.91}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$

Revendications:

1. Des nanomatériaux et matériaux massifs ayant des propriétés :
 - a- Ferrimagnétiques,
 - b- Demi-métalliques,
 - c- Un moment de saturation contrôlable par : le type et la concentration des éléments magnétiques à co-doper dans le semi-conducteur SnO₂ et la température de calcination.
 - d- Un champ coercitif contrôlable par : le type et la concentration des éléments magnétiques à co-doper dans le semi-conducteur SnO₂ et la température de calcination.

Caractérisés en ce qu'ils sont fabriqués par un dopage de (Fe, Mn), (Fe, Co) ou (Mn, Co) dans le semi-conducteur SnO₂.

2. Des nanomatériaux et matériaux massifs ayant des propriétés :
 - a- Ferromagnétiques,
 - b- Demi-métalliques,
 - c- Un moment de saturation contrôlable par : le type et la concentration des éléments magnétiques à tri-doper dans le semi-conducteur SnO₂ et la température de calcination.
 - d- Un champ coercitif contrôlable par : le type et la concentration des éléments magnétiques à tri-doper dans le semi-conducteur SnO₂ et la température de calcination.

Caractérisés en ce qu'ils sont fabriqués par un tri-dopage des éléments Fe, Mn et Co dans le semi-conducteur SnO₂.

3. Les nanomatériaux et matériaux selon 1 ou 2 caractérisés en se qu'ils sont utilisables dans les composants électroniques et spintroniques.

Figures

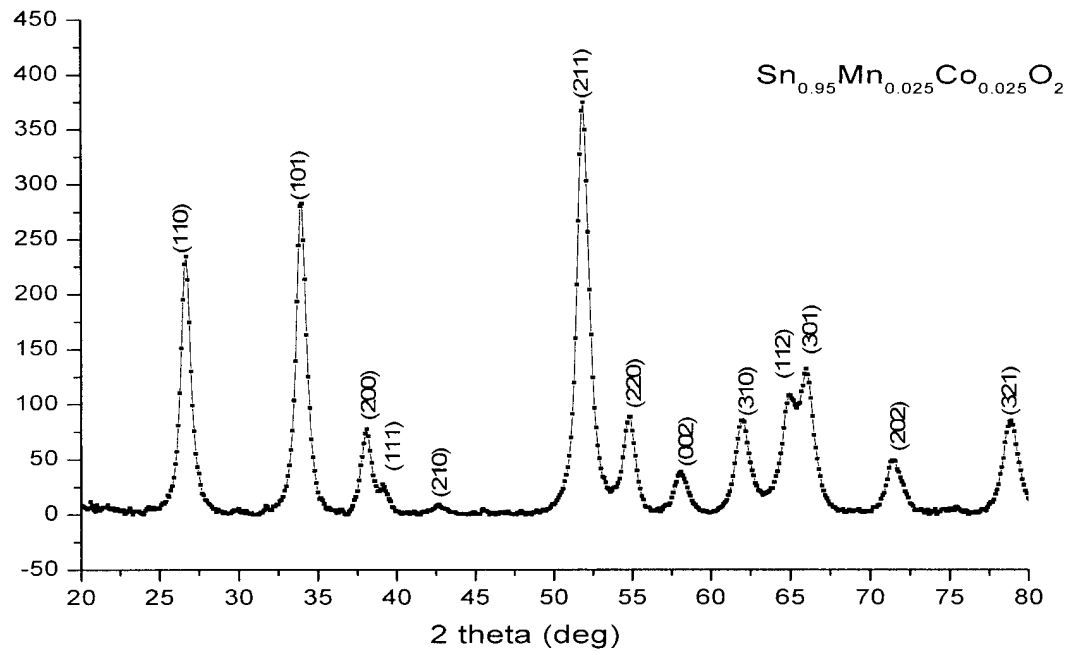


Figure 1

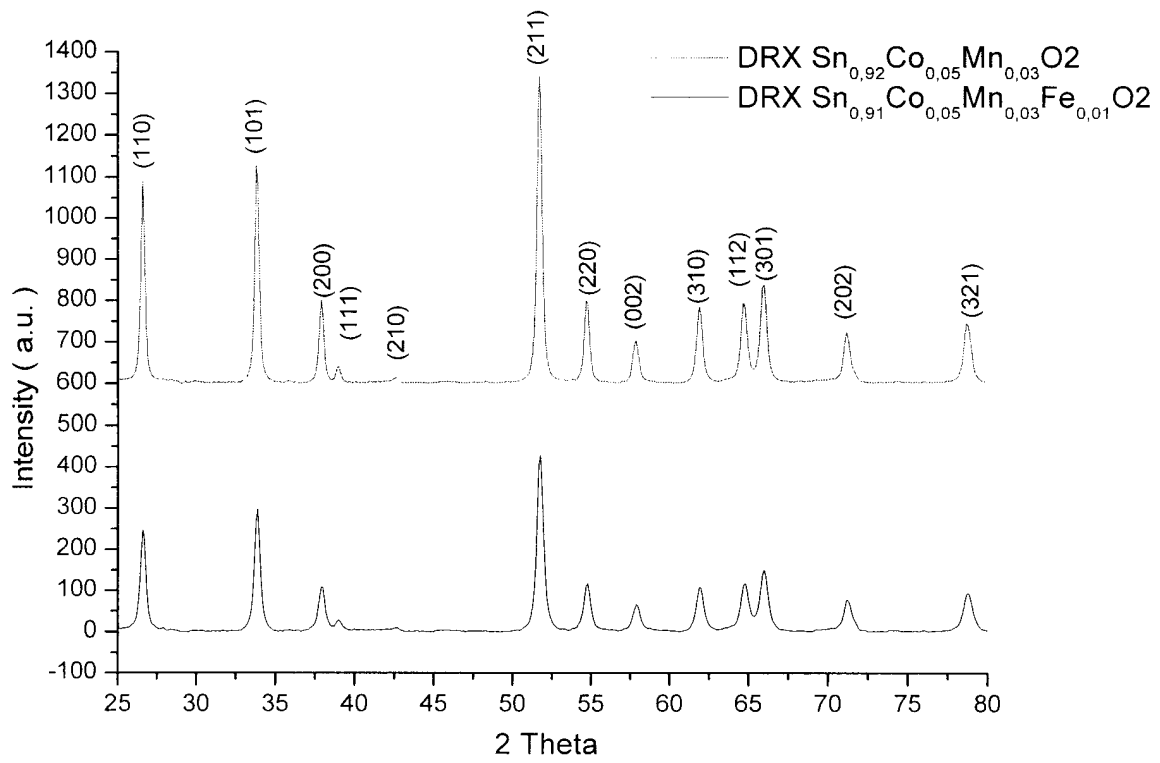


Figure 2

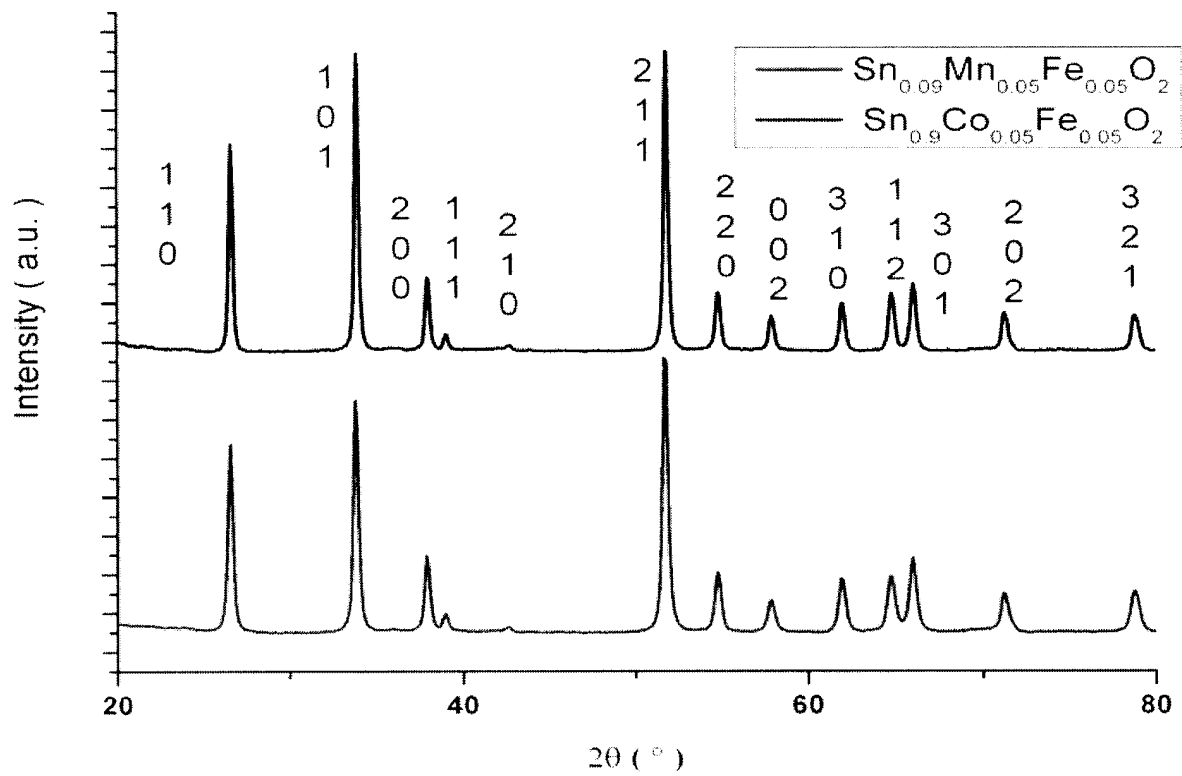


Figure 3

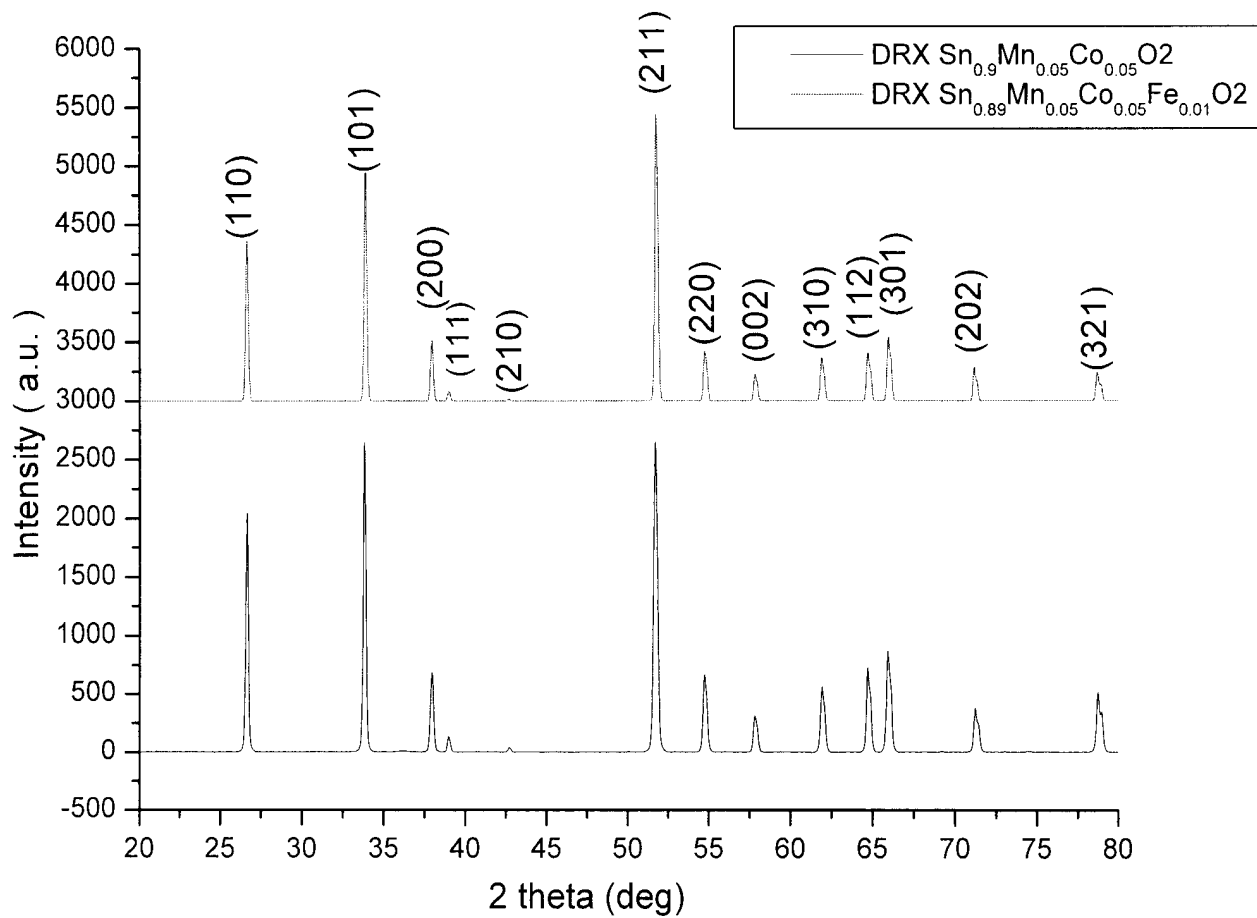


Figure 4

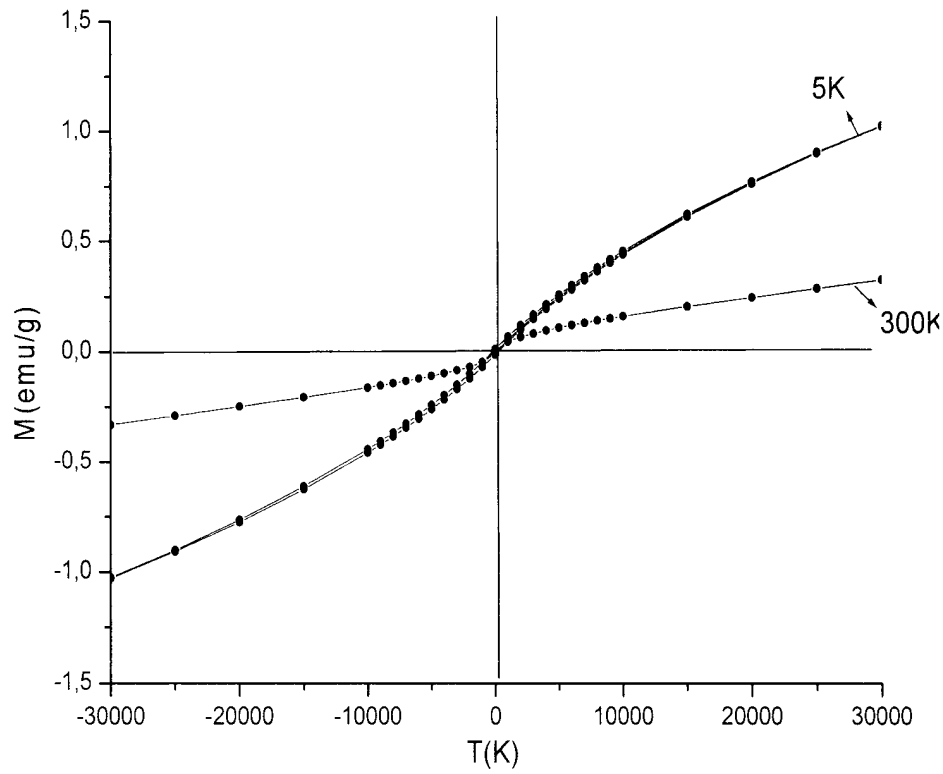


Figure 5

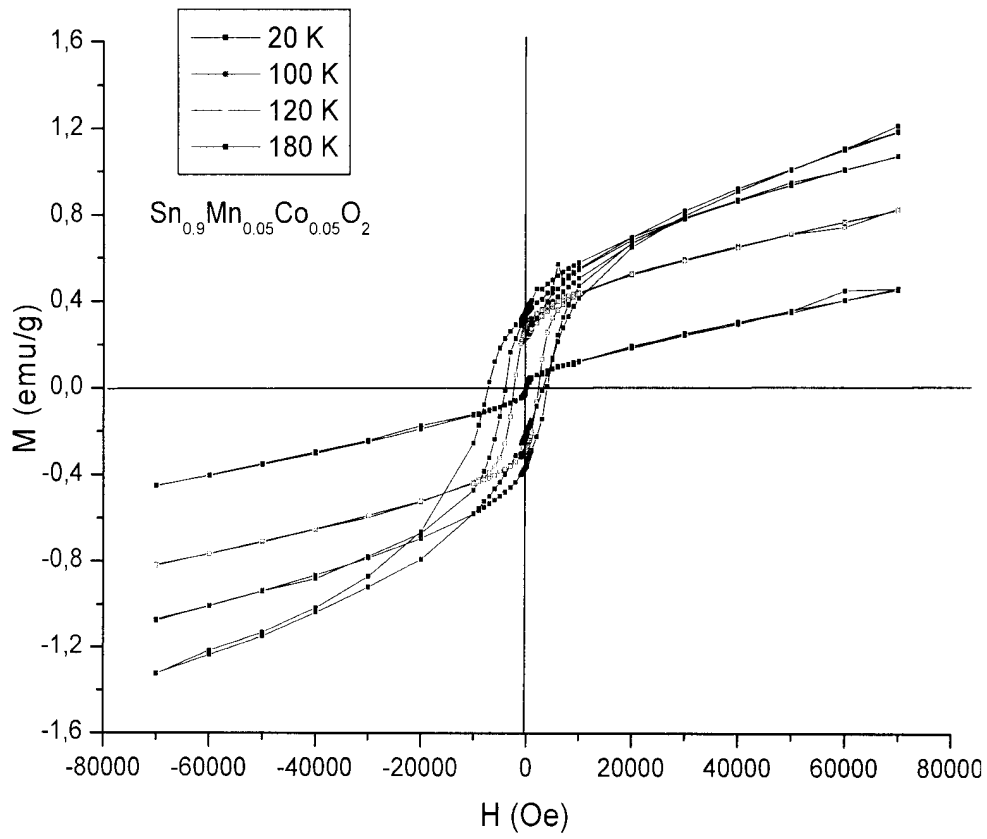


Figure 6

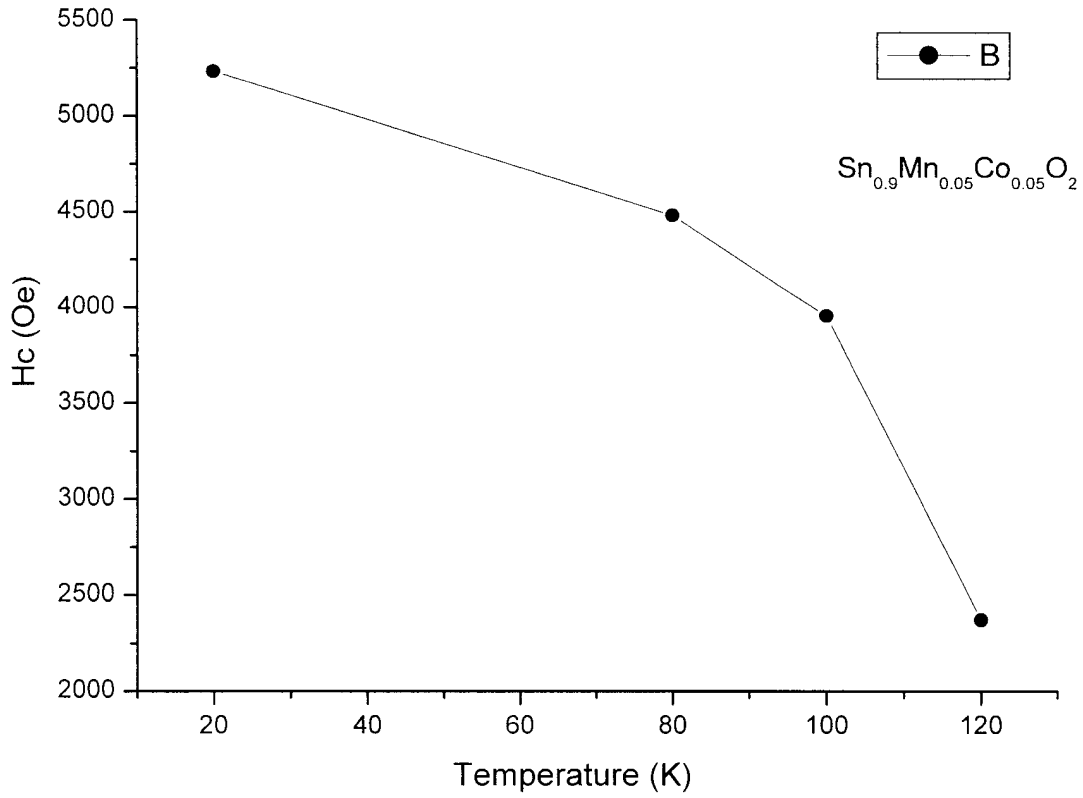


Figure 7

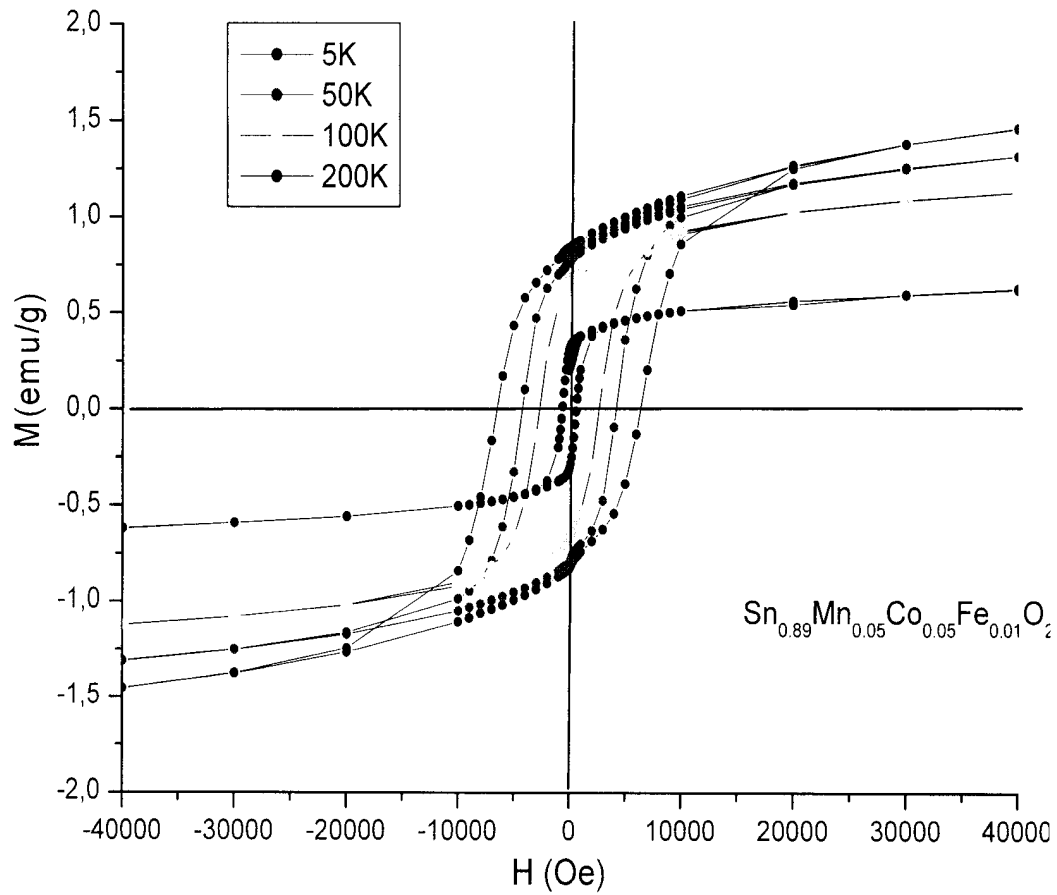


Figure 8

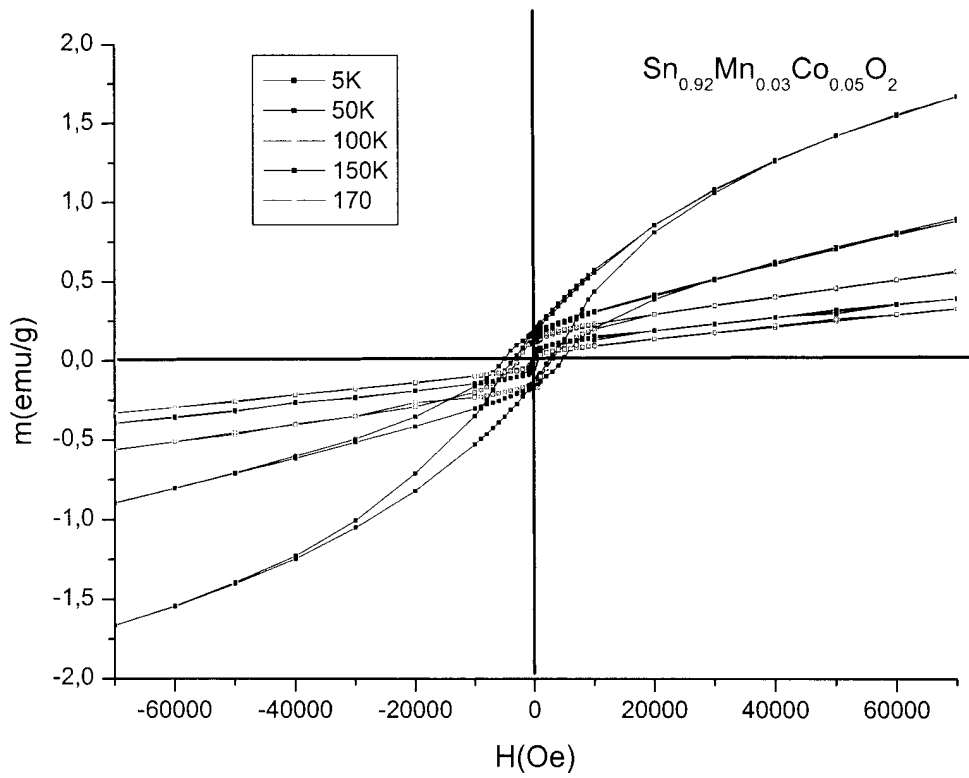


Figure 9

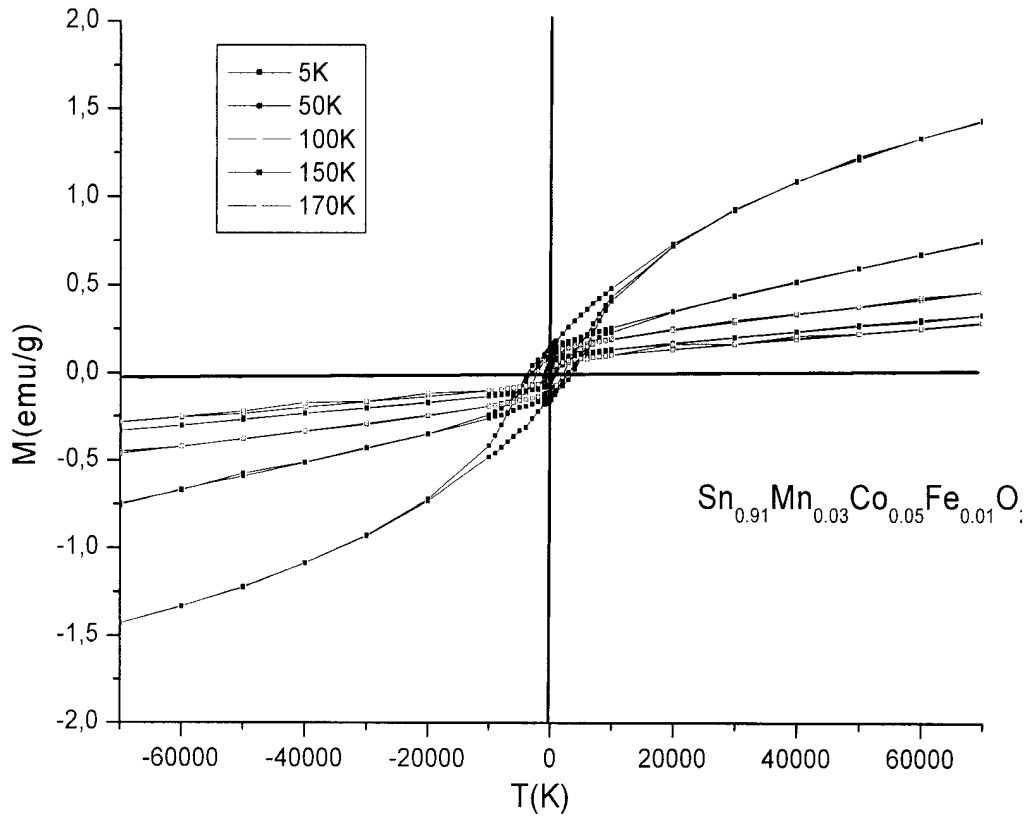


Figure 10

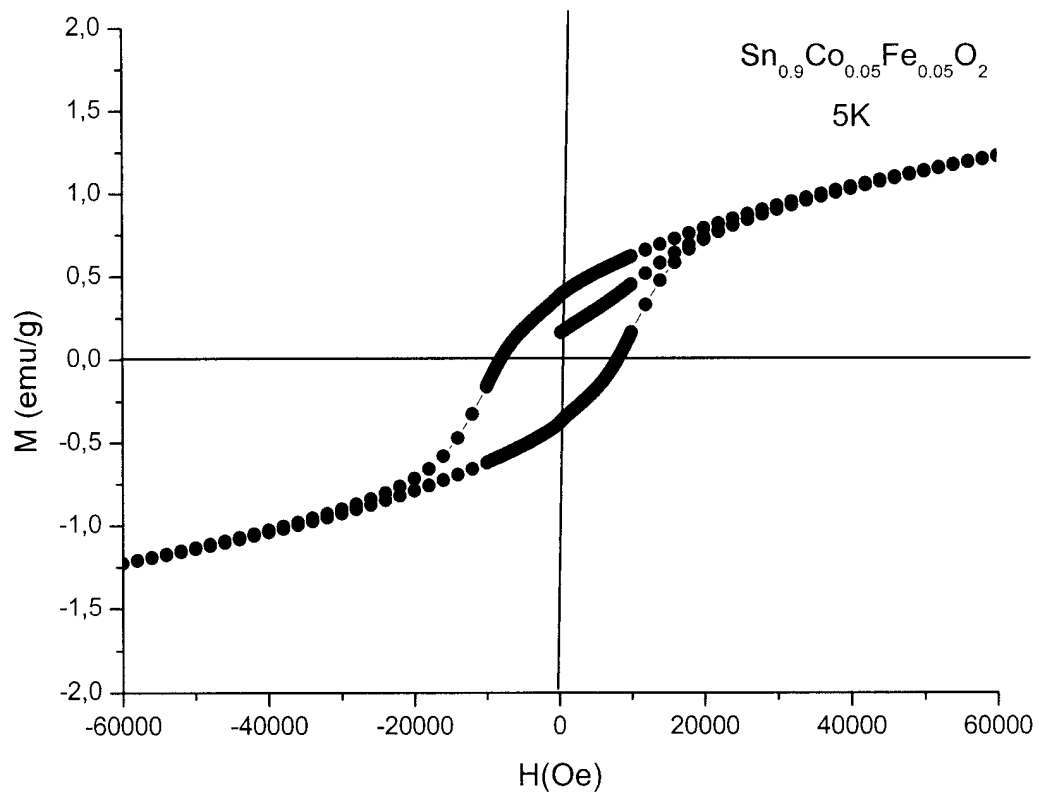


Figure 11

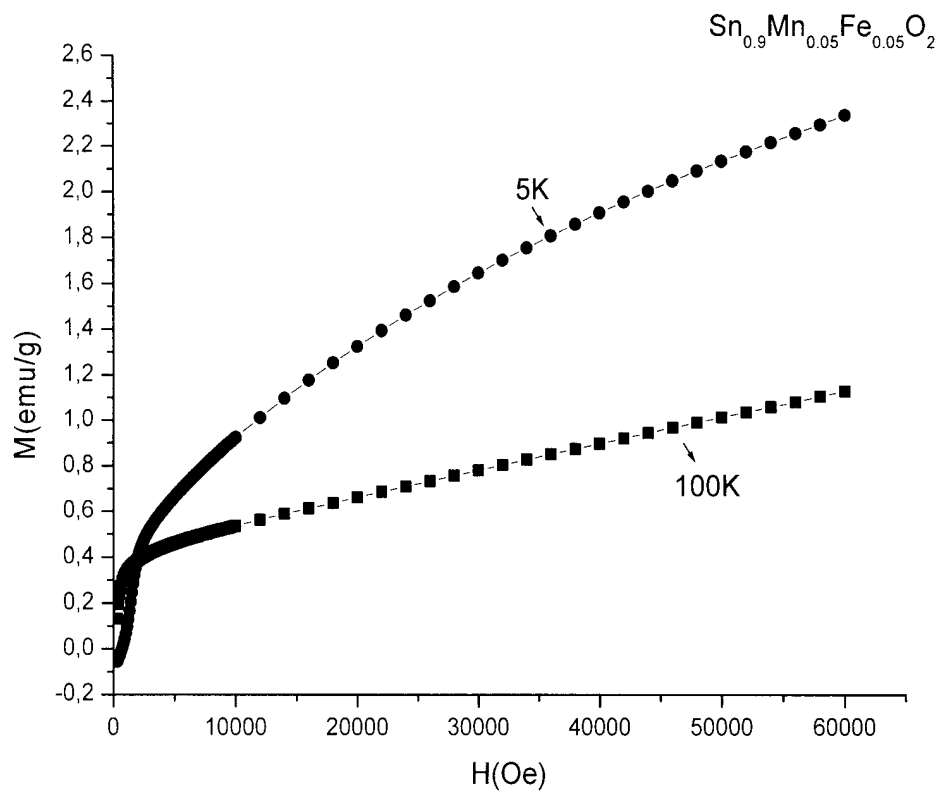


Figure 12

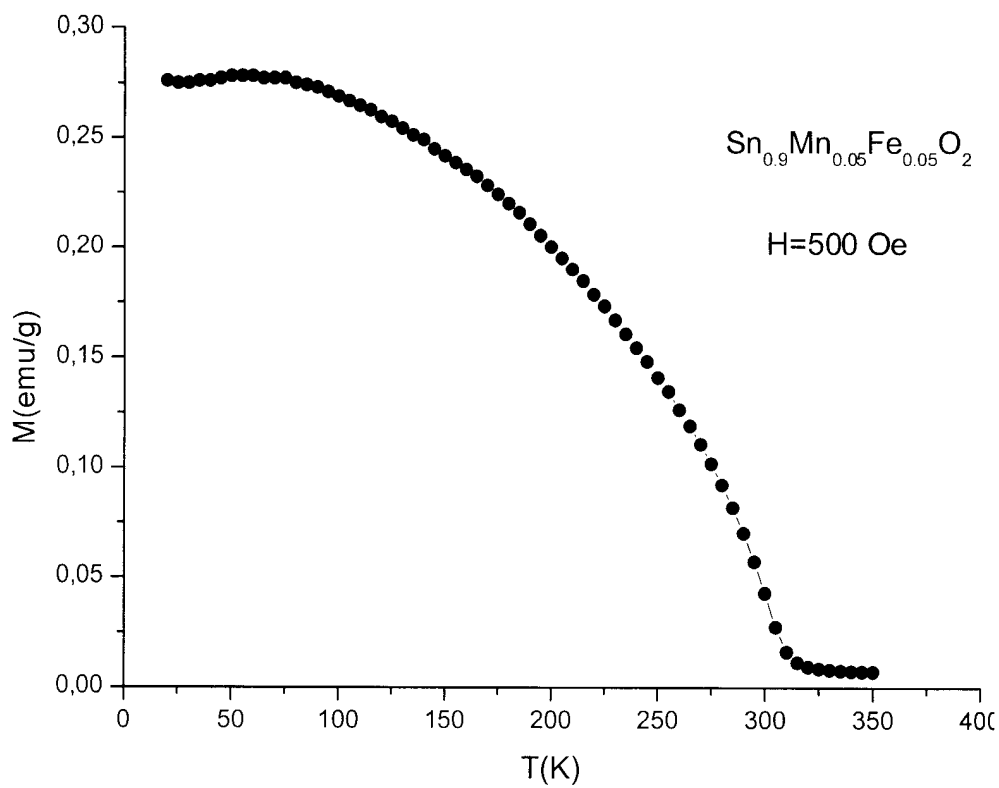


Figure 13

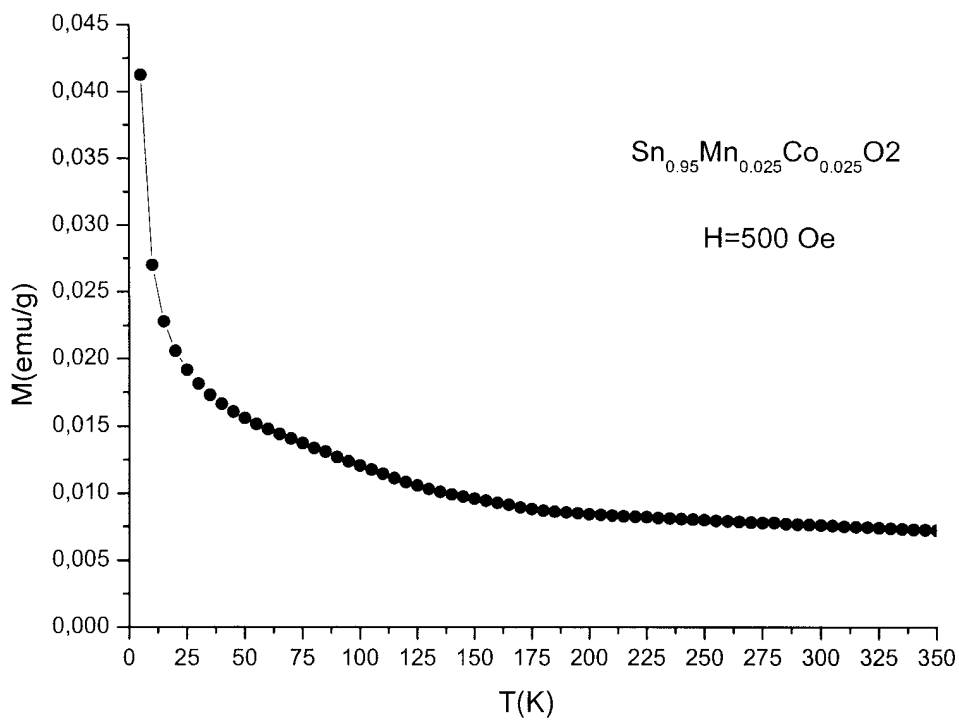


Figure 14

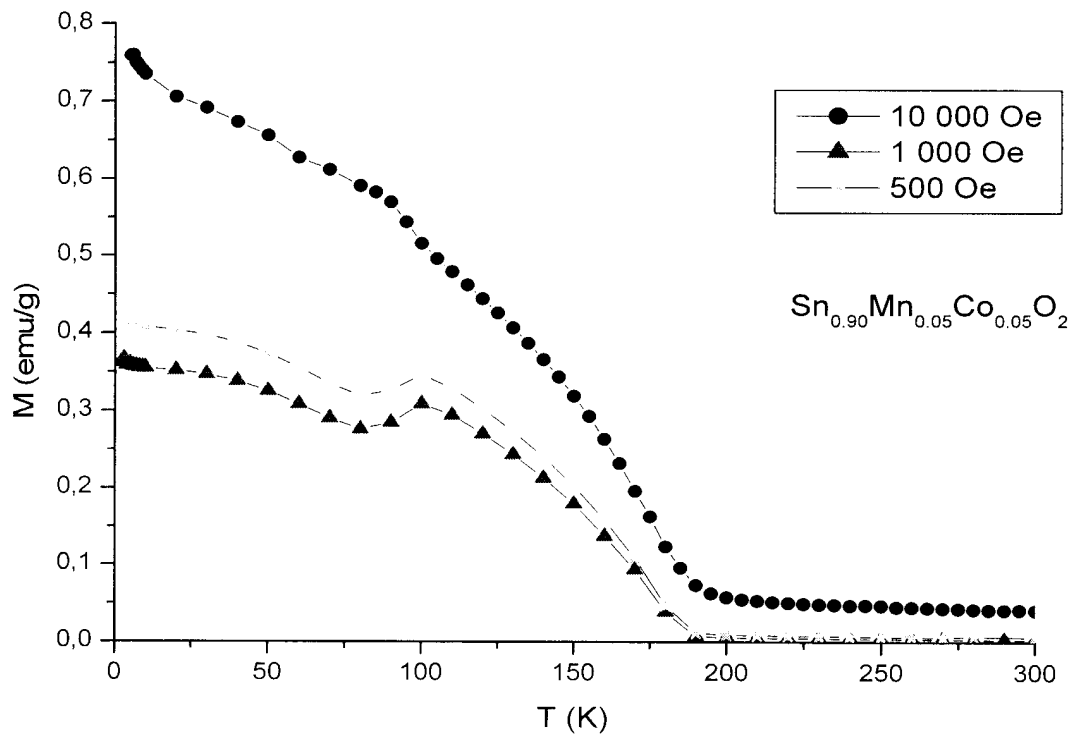


Figure 15

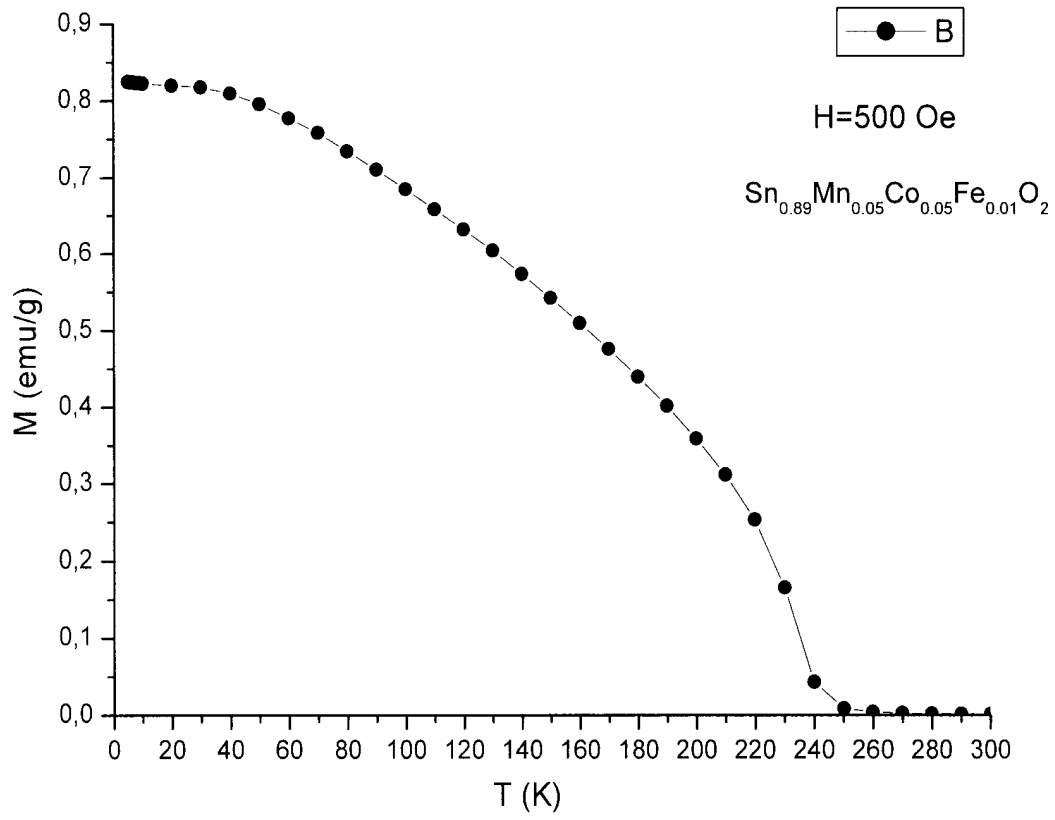


Figure 16

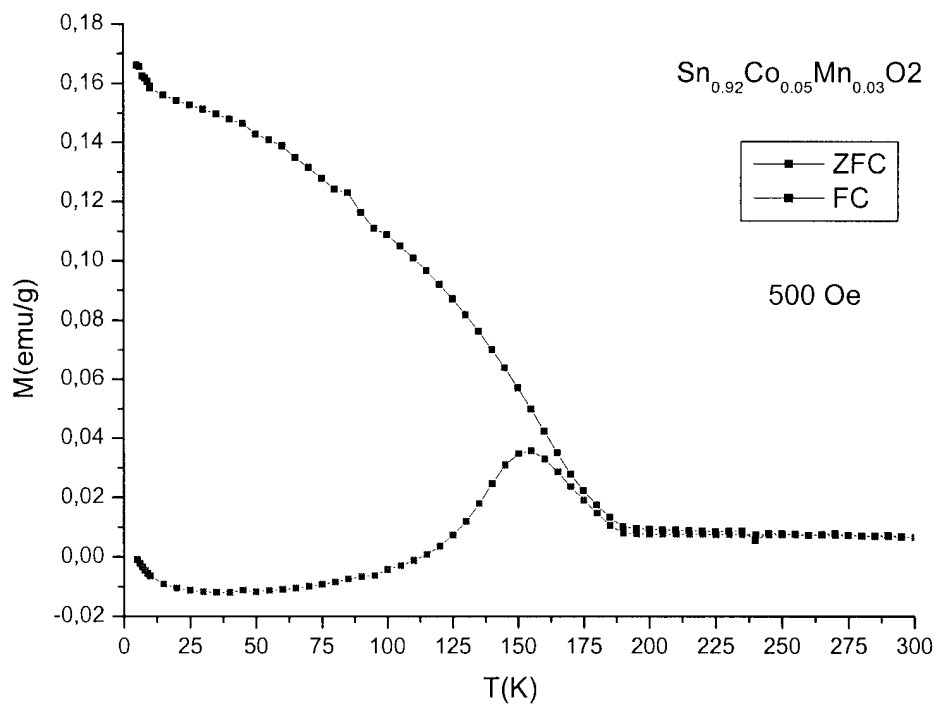


Figure 17

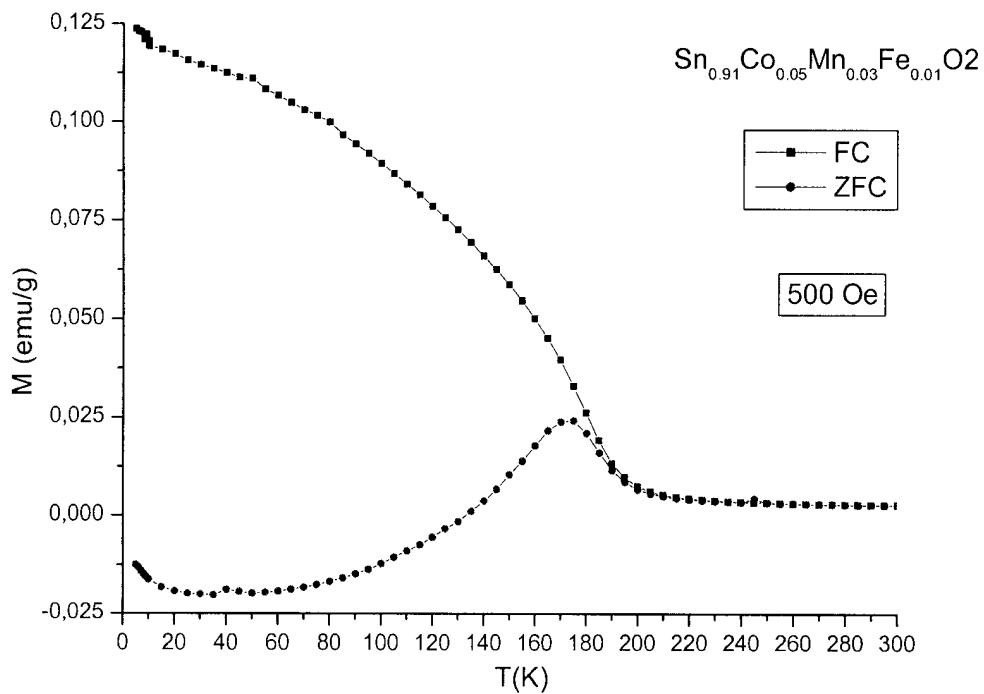


Figure 18

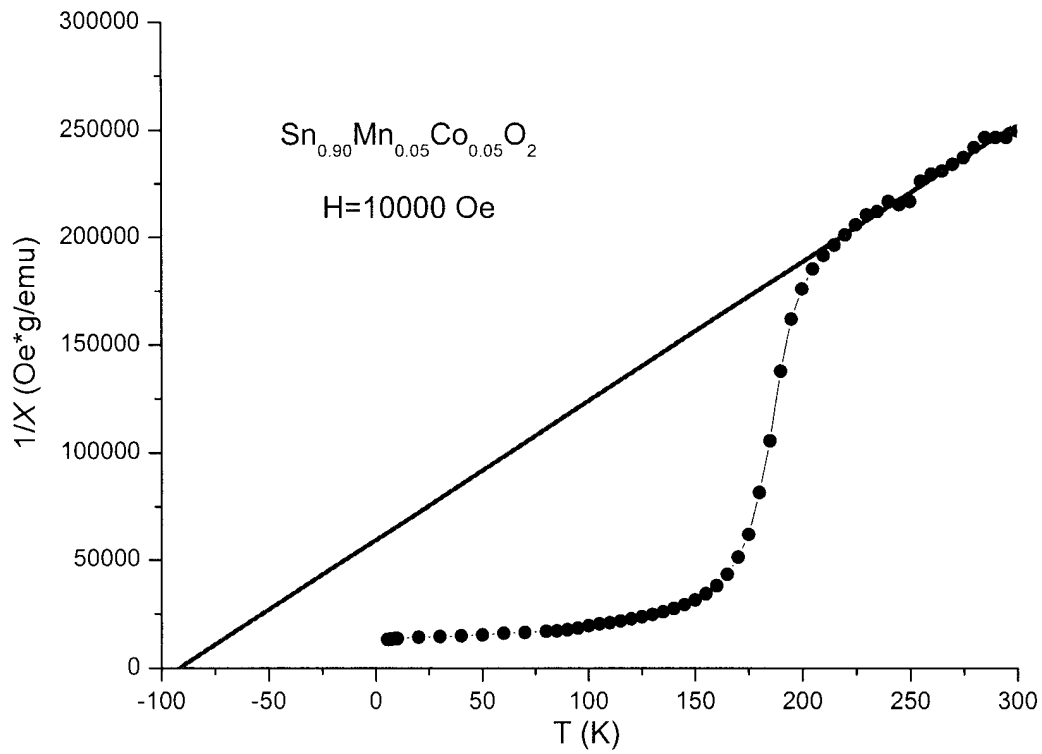


Figure 19

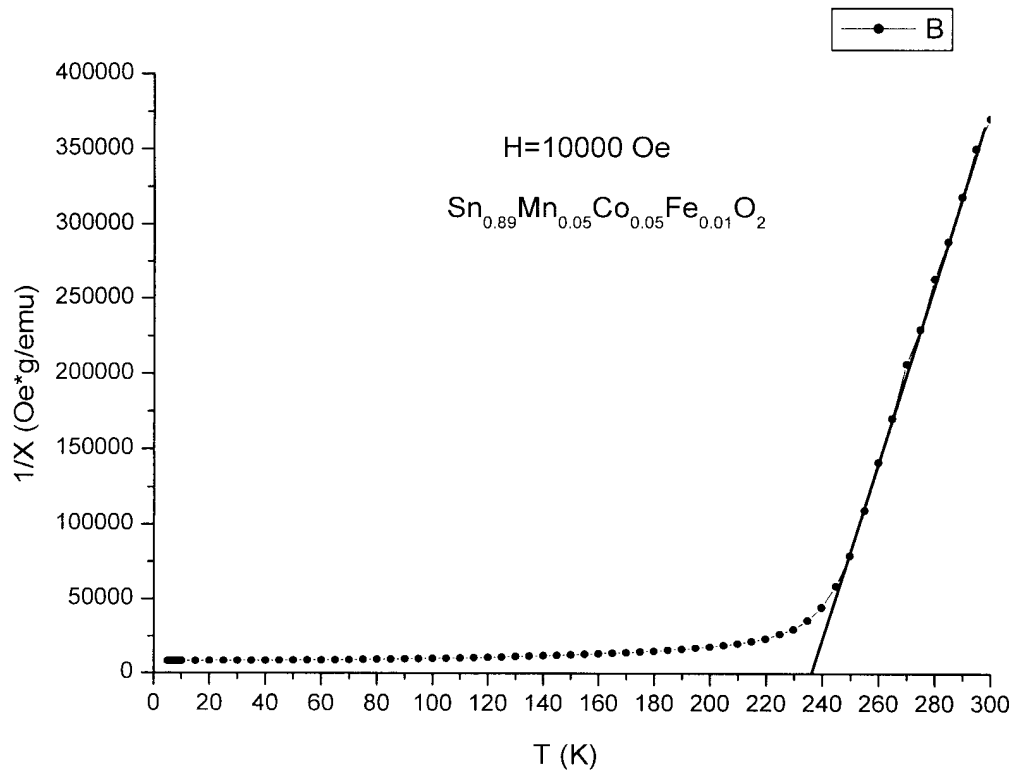


Figure 20

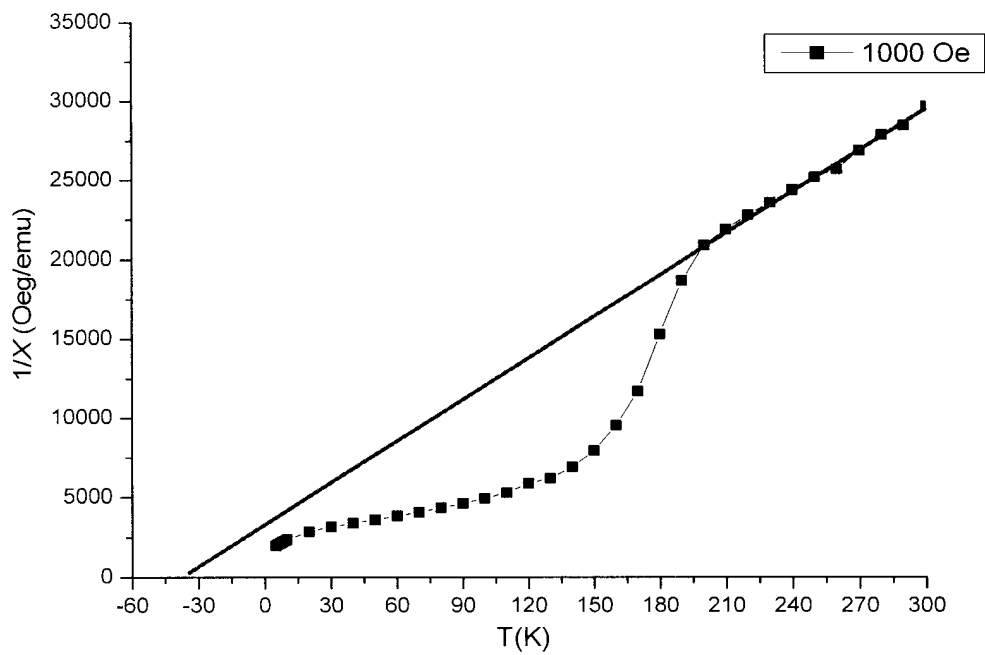


Figure 21

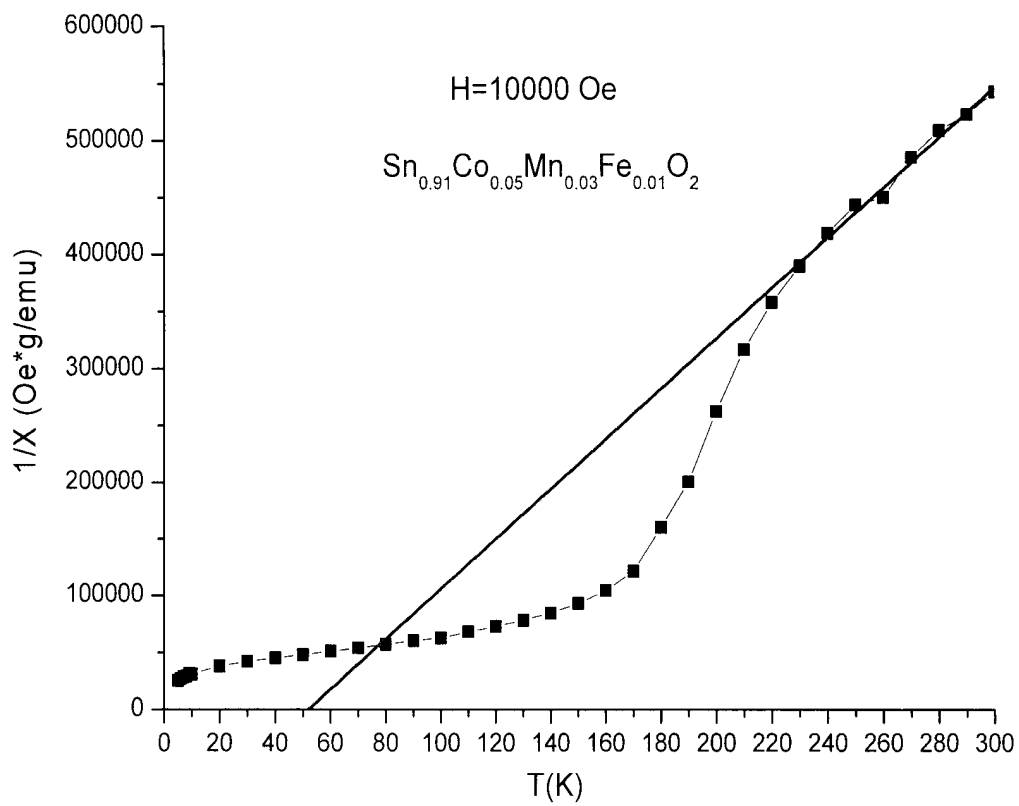


Figure 22

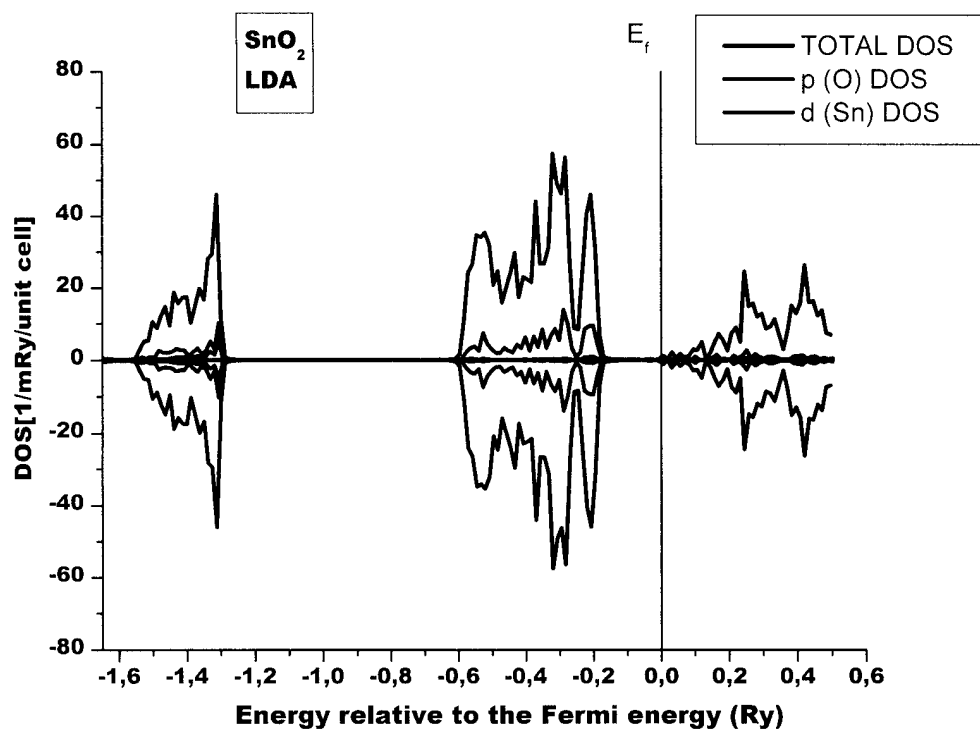


Figure 23

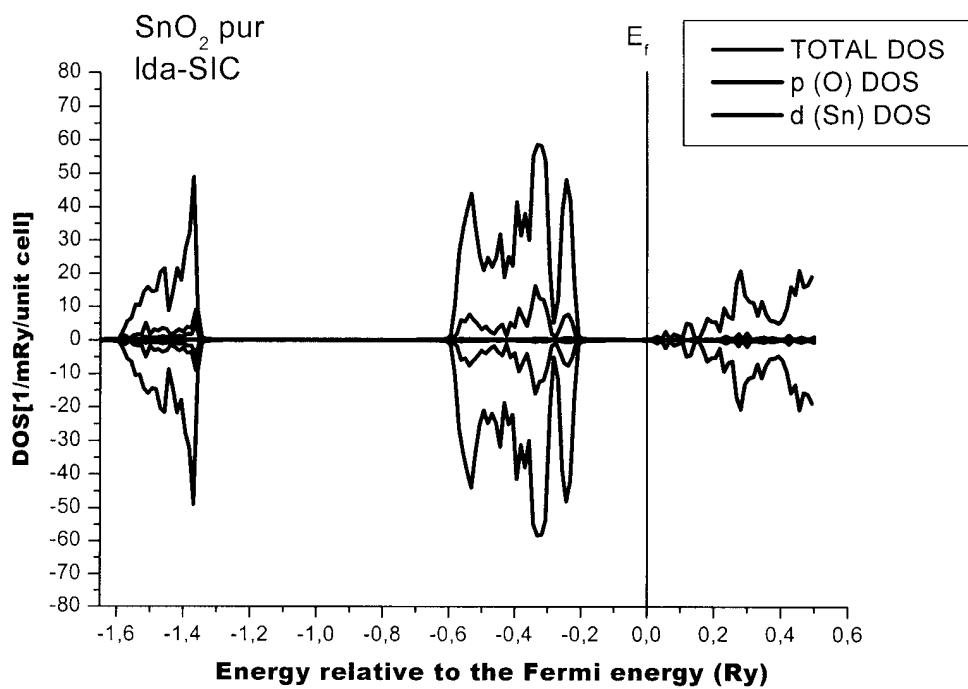


Figure 24

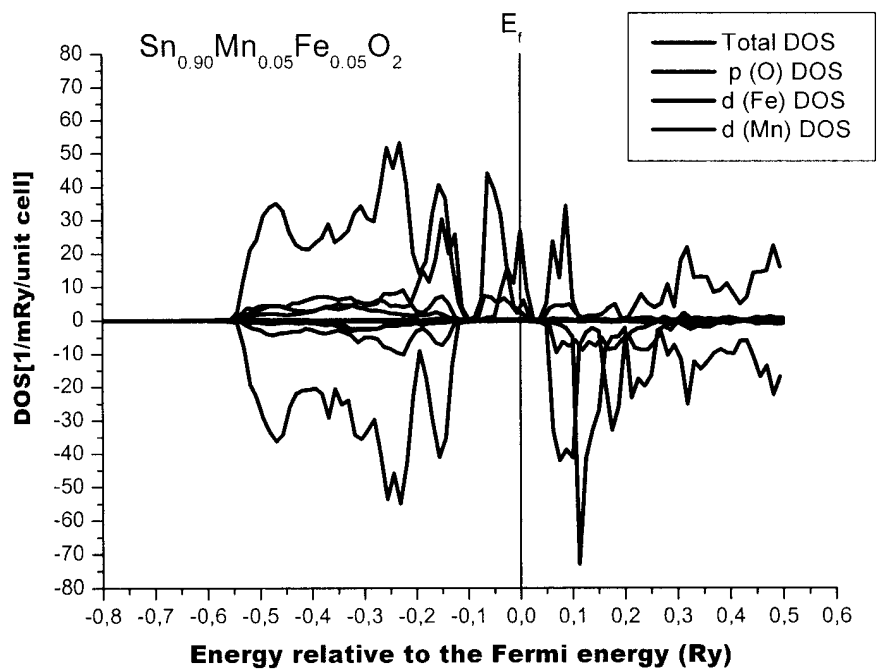


Figure 25

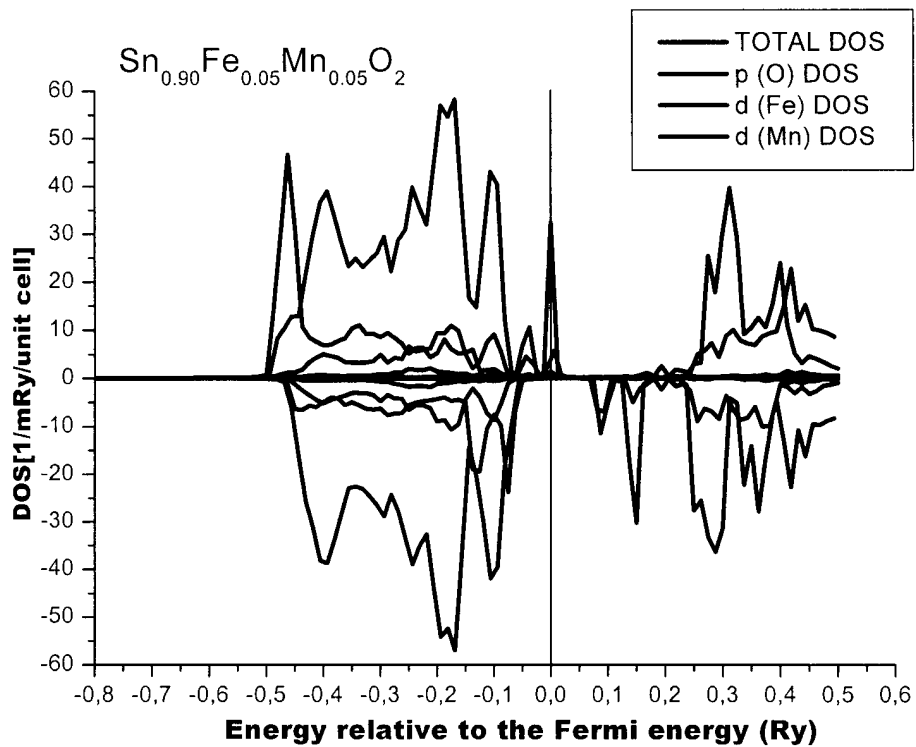


Figure 26

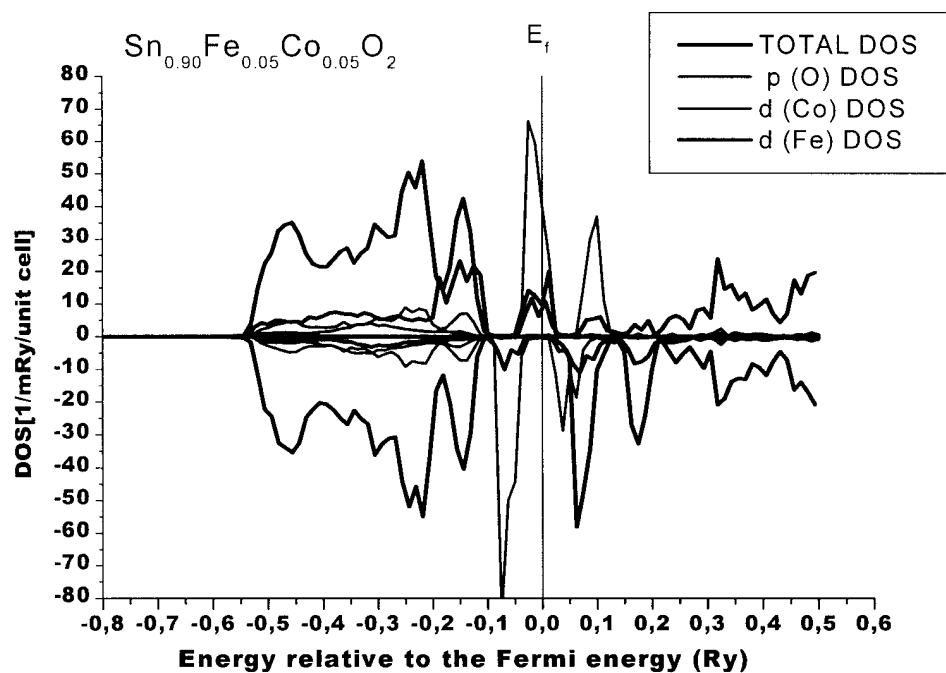


Figure 27

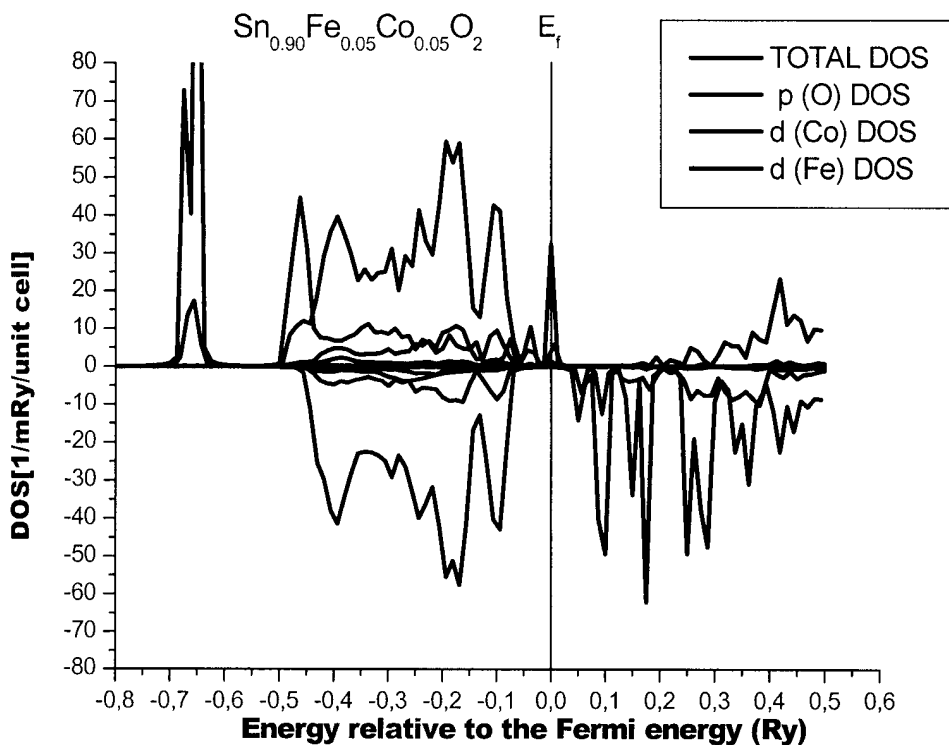


Figure 28

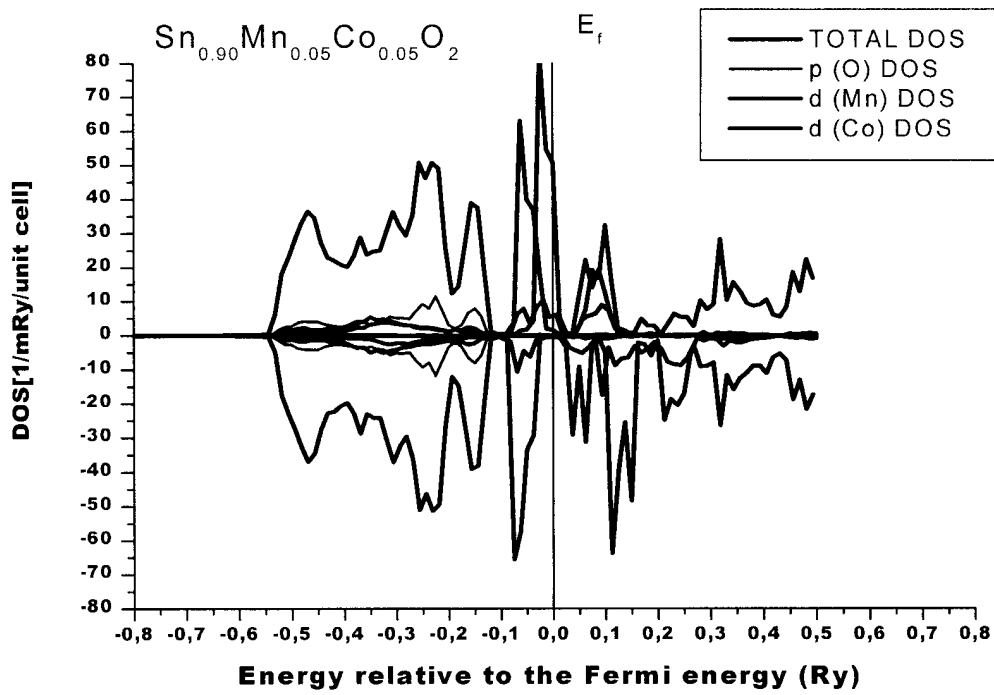


Figure 29

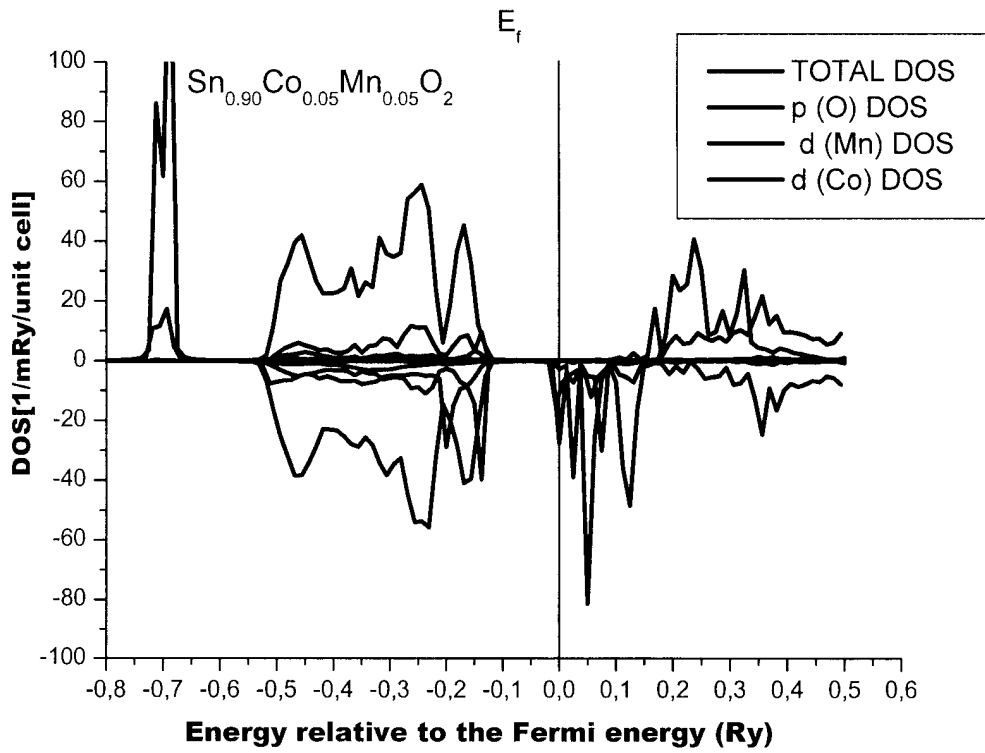


Figure 30

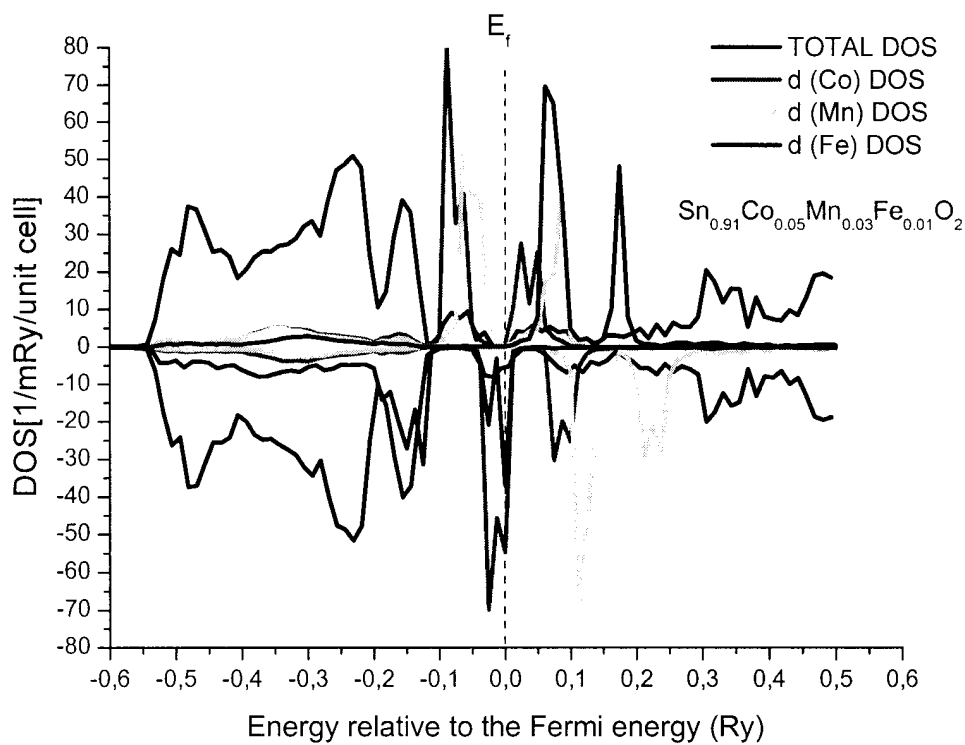


Figure 31

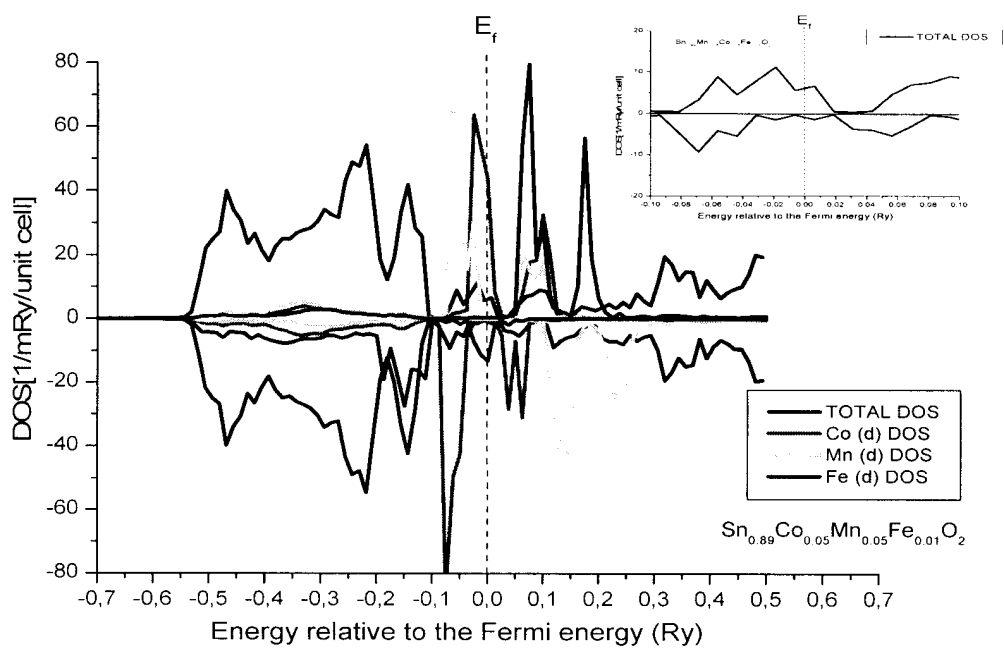


Figure 32

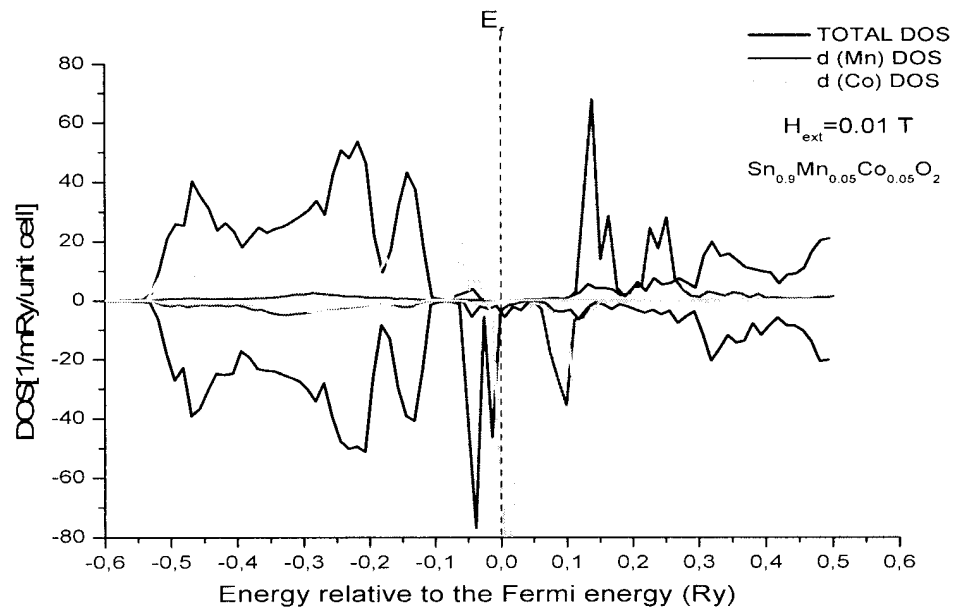


Figure 33

Nanoparticules	Paramètres de maille			Taille des nanoparticules (nm)
	a-axis=b-axis	c-axis	V(A ³)	D
SnCo_{0.05}Mn_{0.03}O₂	4.80	3.19	73.49	22.29
SnCo_{0.05}Mn_{0.03}Fe_{0.01}O₂	4.75	3.19	71.97	19.64
Sn_{0.9}Co_{0.05}Fe_{0.05}O₂	4.72	3.18	71.16	22.67
Sn_{0.9}Mn_{0.05}Fe_{0.05}O₂	4.79	3.18	73.22	22.28
Sn_{0.95}Co_{0.025}Mn_{0.025}O₂	4.73	3.17	71.11	9.80

Le tableau 1

Massif	Paramètres de maille			Moment total (μ _B) (calcul ab-initio)			
	a-axis=b-axis	c-axis	V(A ³)				
SnO₂ [22]	4.73	3.18	71.49	0.12			
Sn_{0.9}Mn_{0.05}Co_{0.05}O₂	4.72	3.18	71.16				
Sn_{0.89}Co_{0.05}Mn_{0.05}Fe_{0.01}O₂	4.73	3.18	71.18				
Sn_{0.89}Co_{0.05}Mn_{0.05}Fe_{0.01}O₂	4.73	3.18	71.18				
		T(K)	H _c (Oe)	M _r (μ _B)	M _s (μ _B)	M _r /M _s	
Sn_{0.89}Co_{0.05}Mn_{0.05}Fe_{0.01}O₂	5	6424.10	0.19	0.14	0.75	0.12	
	50	4416.56	0.17	0.13	0.77		
	100	2743.62	0.14	0.12	0.83		
	200	686.63	0.0822	0.0612	0.74		

Le tableau 2

Le tableau 3

Nanoparticules	T(K)	H _c (Oe)	M _r (μ _B)	M _s (μ _B)	M _r /M _s
Sn_{0.92}Co_{0.05}Mn_{0.03}O₂	5K	3119	0.0053	0.043	0.120
	50K	5020	0.0044	0.023	0.191
	100K	2781	0.0035	0.014	0.250
	150K	276	0.0009	0.010	0.091
	170K	94	0.0002	0.008	0.025

Le tableau 4

Nanoparticules	T (K)	H _c (Oe)	M _r (μ _B)	M _s (μ _B)	M _r /M _s
Sn_{0.91}Co_{0.05}Mn_{0.03}Fe_{0.01}O₂	5K	2997	0.0038	0.037	0.102
	50K	3600	0.0032	0.019	0.168
	100K	2151	0.0028	0.012	0.23
	150K	723	0.0015	0.008	0.18
	170K	204	0.0007	0.007	0.10

Le tableau 5

Nanoparticules	T (K)	H _c (Oe)	Mr(emu/g)	Ms(emu/g)	M _r /M _s
Sn_{0.95}Co_{0.025}Mn_{0.025}O₂	5K	212	0.269	1.027	0.26
	300K	132	0.10735	0.3195	0.09

Le tableau 6

	Moments(μ _β) Pour LDA	Moments(μ _β) Pour LDA+SIC	Polarisation au niveaux de Fermi
Sn_{0.89}Mn_{0.05}Fe_{0.05}O₂	0.230 (Total) -3.4779 (Fe) 2.63013(Mn)	0.230 (Total) -3.9190 (Fe) 2.2252(Mn)	100%

Le tableau 7

	Moments(μ _β) Par LDA	Moments(μ _β) Par LDA+SIC	Polarisation au niveau de Fermi
Sn_{0.89}Co_{0.05}Fe_{0.05}O₂	0.0750 (Total) -3.3901 (Fe) -0.7842(Co)	0.230 (Total) 3.9050 (Fe) 4.1101(Co)	100%

Le tableau 8

	Moments(μ _β) Par LDA	Moments(μ _β) Par LDA+SIC	Polarisation au niveau de Fermi
--	-------------------------------------	-----------------------------------------	------------------------------------

$\text{Sn}_{0.89}\text{Mn}_{0.05}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$	0.230 (Total) -0.71717 (Co) 2.61790(Mn)	0.230 (Total) -4.1108 (Co) 2.7052(Mn)	100%
--------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------	---------------------------------------------	------

Le tableau 9

	Moments μ_β	Polarisation au niveau de Fermi
$\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.03}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$	0.1855 (Total) 0.85662 (Co) 2.61106 (Mn) -3.41710 (Fe)	100%

Le tableau 10

	Moments μ_β	Polarisation au niveau de Fermi
$\text{Sn}_{0.89}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{Fe}_{0.01}\text{O}_2$	Theo: 0.127(Total) Exp: 0.145 @ 5K -0.79307 (Co) 2.614 (Mn) -3.388 (Fe)	$\approx 100\%$

Le tableau 11