



Sujet de stage Master 2 Structure électronique et propriétés magnétiques de multicouches à base d'alliages d'Heusler

Responsables : Lionel Calmels (calmels@cemes.fr - 0562257879)
Rémi Arras (arras@cemes.fr - 0562257856)

L'électronique de spin a permis de concevoir des jonctions tunnel magnétiques et des vannes de spin qui sont les composants de base des mémoires magnétiques (MRAM) ou des têtes de lectures de disques durs. Ces composants contiennent deux électrodes magnétiques séparées par un isolant non magnétique. Les électrodes peuvent avoir des aimantations parallèles ou antiparallèles, ce qui permet de stocker un bit d'information dont l'écriture est assurée soit par un champ magnétique externe, soit grâce au couple exercé par un courant électrique polarisé en spin (spin-torque). Cette information magnétique peut ensuite être lue en mesurant la résistance électrique de ces composants, qui dépend de la configuration magnétique des électrodes. Des calculs quantiques *ab-initio* sont indispensables pour comprendre le comportement physique de ces multicouches. C'est dans ce cadre que l'on peut correctement décrire les états électroniques des électrodes participant au transport, ainsi que le raccordement des fonctions d'onde aux interfaces. Les calculs *ab-initio* permettent également de quantifier l'anisotropie magnétique des électrodes, ce qui est important pour l'optimisation des composants, l'intensité du courant électrique nécessaire au renversement d'aimantation par effet spin-torque étant moindre quand l'anisotropie magnétique est perpendiculaire aux interfaces.

Nous proposons une étude théorique portant sur le calcul de la structure électronique et des propriétés magnétiques de couches minces d'alliages d'Heusler (full-Heusler alloys), composés de formule chimique X_2YZ , où X et Y sont des métaux de transition (Mn, Fe, Co) et Z un élément léger (Al, Si, Ga). L'originalité de ces alliages ferromagnétiques est due à leur demi-métallicité (ces cristaux sont conducteurs pour les électrons de spin majoritaire et isolants pour les électrons de spin minoritaire) ainsi qu'à leur température de Curie élevée. Ces alliages peuvent donc être utilisés comme matériaux d'électrodes dans des vannes de spin ou des jonctions tunnel aux propriétés de magnéto-transport exceptionnelles.

Le stage portera sur l'étude des interfaces $X_2YZ/MgO(001)$, $X_2YZ/Cr(001)$, et $X_2YZ/Ag(001)$ susceptibles de jouer un rôle important dans ces composants spintroniques. Il s'agira de comprendre comment ces interfaces modifient la structure électronique et les moments magnétiques des alliages d'Heusler. Le stage permettra également de vérifier si ces interfaces sont susceptibles de modifier l'anisotropie magnétique, afin d'obtenir des superréseaux à base d'alliage d'Heusler dont l'anisotropie magnétique est perpendiculaire aux couches.

Le stage se déroulera au sein de l'équipe « NanoMatériaux Magnétiques » du groupe « NanoMatériaux ». Cette équipe a une bonne expérience du calcul de la structure électronique des couches magnétiques métalliques [1-3], des couches magnétiques d'oxydes [4,5] ainsi que de l'anisotropie magnétique de ces matériaux [6]. Les calculs seront effectués sur le calculateur du mésocentre de calcul CALMIP.

- [1] B. Belhadji and L. Calmels, Phys. Rev. B **83**, 092401 (2011).
- [2] F. Gimbert, L. Calmels, and S. Andrieu, Phys. Rev. B **84**, 094432 (2011).
- [3] F. Bonell, T. Hauet, S. Andrieu, F. Bertylan, P. Le Fevre, L. Calmels, A. Tejada, F. Montaigne, B. Warot-Fonrose, B. Belhadji, A. Nicolaou, and A. Taleb-Ibrahimi, Phys. Rev. Lett. **108**, 176602 (2012).
- [4] R. Arras, L. Calmels, and B. Warot-Fonrose, Phys. Rev. B **81**, 104422 (2010).
- [5] R. Arras, L. Calmels, and B. Warot-Fonrose, Appl. Phys. Lett. **100**, 032403 (2012).
- [6] F. Gimbert and L. Calmels, Phys. Rev. B **86**, 184407 (2012).