

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة عمار ثليجي - الأغواط

ميدان: علوم المادة  
فرع: فيزياء  
تخصص: فيزياء تطبيقية



كلية العلوم  
قسم الفيزياء  
رقم:

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي  
اعداد الطالبة: عبودي فاطمة  
تحت عنوان

دراسة نظرية للخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية، لمركبات هوسلر الكاملة Full-Heusler:  
 $\text{NaMnZ}_2$  و  $\text{NaVZ}_2$  حيث  $(Z = O, S)$

لجنة المناقشة:

رئيساً	جامعة الأغواط	الأستاذ: مباركي حنفي
ممتحناً	جامعة الأغواط	الأستاذ: بورورو يحي
مؤطراً	جامعة الأغواط	الأستاذ: بن مخلوف عبد النور
مؤطراً مساعداً	جامعة الأغواط	الأستاذ: فايد فارس

السنة الجامعية: 2021-2022

## شكر وعرّفان

نحمد الله سبحانه وتعالى أن وفقنا على إنجاز هذا العمل المتواضع والذي نسال الله عز وجل أن يجعله خالصا لوجهه الكريم لابد لنا أن تقدم أسمى معاني الشكر والامتنان والتقدير إلى الذين مهدوا لنا طريق العلم والمعرفة وأخص بالتقدير والشكر الأستاذ "بن مخلوف عبد النور" مؤطرا، والأستاذ "فايد فارس" مؤطرا مساعدا وهوما صاحبا الفضل الأول في هذه المذكرة حيث نشكرهم على توجيهاتهم وإرشاداتهم القيمة لكم منا أرقى وأسمى عبارات التقدير والعرّفان. وإلى كل من ساعدنا من قريب أو من بعيد في هذا العمل لكم منا جزيل الشكر والعرّفان "فاطمة قراد"، "هيبه لعراي" ، "محبوبة خثيري".

كما لا يفوتنا أن نشكر الأساتذة الذين شرفونا بقبول مناقشة هذه المذكرة الأستاذ "مباركي حنيفي"،

الأستاذ "بورورو يحي".

## شكر وعرّفان

نحمد الله سبحانه وتعالى أن وفقنا على إنجاز هذا العمل المتواضع والذي نسال الله عز وجل أن يجعله خالصا لوجهه الكريم لابد لنا أن نقدم أسمى معاني الشكر والامتنان والتقدير إلى الذين مهدوا لنا طريق العلم والمعرفة وأخص بالتقدير والشكر الأستاذ المشرف "فايد فارس" صاحب الفضل الأول في هذه المذكرة حيث نشكره على توجيهاته وإرشاداته القيمة لك منا أرقى وأسمى عبارات التقدير والعرّفان.

وإلى كل من ساعدنا من قريب أو من بعيد في هذا العمل لكم منا جزيل الشكر والعرّفان "فاطمة قراد"، هيبه لعراي".  
كما لا يفوتنا أن نشكر الأساتذة الذين شرفونا بقبول مناقشة هذه المذكرة الأستاذ "مباركي حنيفي"، الأستاذ "برورو يحيى".

## قائمة الأشكال

الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل
الفصل الأول		
13	الشكل (1.I): تمثيل الكمون " Muffin-Tin " MT.	(1.I)
الفصل الثاني		
21	العزم المغناطيسي للمواد: (1) Ferromagnétisme، (2) Antiferromagnétisme، (3) Ferrimagnétisme.	(1.II)
21	الجدول الدوري يوضح العناصر X، Y و Z التي تتشكل منها مركبات Heusler.	(2.II)
22	يمثل بنية سبيكة هوسلر من النوع full-Heusler $X_2YZ$ حيث: X=•، Y=• و Z=•.	(3.II)
24	يمثل بنية سبيكة هوسلر من النوع Half-Heusler XYZ حيث: X=•، Y=• و Z=•.	(4.II)
25	تمثيل تخطيطي لكثافات الحالات واستقطاب الدوران: (1) Non Ferromagnétisme، (2) Ferromagnétisme، (3) demi-métalliques.	(5.II)
26	صمام العزم المغزلي Vannes de spin.	(6.II)
الفصل الثالث		
33	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaVO_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في الحالة (NF/FM).	(1.III)
33	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaVS_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في الحالة (NF/FM).	(2.III)
34	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaMnO_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في الحالة (NF/FM).	(3.III)
34	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaMnS_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في الحالة (NF/FM).	(4.III)
38	أحزمة الطاقة للمركب $NaVO_2$ وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(5.III)
38	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnO_2$ وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(6.III)
39	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnS_2$ وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(7.III)
39	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnS_2$ وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(8.III)
42	كثافة الحالة TDOS للمدارات للمركب $NaVZ_2$ ( $Z = O, S$ ) والجزئية PDOS.	(9.III)
43	كثافة الحالة TDOS للمركب $NaVZ_2$ ( $Z = O, S$ ) والجزئية PDOS المحسوب بواسطة GGA.	(10.III)
44	كثافة الحالة TDOS للمدارات للمركب $NaMnZ_2$ ( $Z = O, S$ ) والجزئية PDOS.	(11.III)
45	كثافة الحالة TDOS للمركب $NaMnZ_2$ ( $Z = O, S$ ) والجزئية PDOS المحسوبة بواسطة GGA.	(12.III)

## الفهرس

I	..... الشكر والعرفان
II	..... الإهداء
IV	..... قائمة الأشكال
IX	..... قائمة الجداول
2	..... مقدمة عامة
5	..... المراجع

### الفصل الأول: نظرية دالية الكثافة DFT

7	..... 1.I مقدمة
7	..... 2.I معادلة شرودينغر Schrödinger
8	..... 3.I تقريب بورن-أوبنهايمر Born-Oppenheimer
9	..... 4.I تقريب هارترى Hartree
9	..... 5. تقريب هارترى-فوك Hartree-Fock
10	..... 6.I نظرية دالة الكثافة DFT
10	..... 1.6.I نظرية هوهانبرغ-كوهن Hohenberg-Kohn
11	..... 2.6.I معادلة كوهن-شام Kohn-Sham
11	..... 3.6.I طاقة التبادل والارتباط
12	..... 1.3.6.I تقريب كثافة الموضع (LDA)
12	..... 2.3.6.I تقريب التدرج المعمم (GGA)
13	..... 7.I طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل
13	..... 1.7.I طريقة الأمواج المستوية المتزايدة
14	..... 2.7.I طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا
14	..... 3.7.I طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW
15	..... 8.I برنامج Wien2k
16	..... المراجع

### الفصل الثاني: عموميات حول سبائك Heusler

18	..... 1.II مقدمة
19	..... 2.II تصنيف المواد المغناطيسية
20	..... 1.2.II مواد Diamagnétiques
20	..... 2.2.II مواد Paramagnétisme
20	..... 3.2.II مواد Ferromagnétisme

20	..... Ferrimagnétisme مواد 4.2.II
20	..... Antiferromagnétisme مواد 5.2.II
21	..... Heusler سبائك 3.II
22	..... البنية البلورية 1.3.II
22	..... Full-Heusler كامل هوسلر 1.1.3.II
23	..... Half-Heusler نصف هوسلر 2.1.3.II
24	..... demi-métalliques المواد نصف معدنية 4.II
25	..... Heusler تطبيقات سبائك 5.II
25	..... تطبيق سبائك هوسلر في الالكترونيات (Spintronics) 1.5.II
25	..... المقاومة المغناطيسية العملاقة GMR 2.5.II
26	..... مقاومة مغناطيسية نفقية (TMR) 3.5.II
28	..... المراجع
الفصل الثالث: النتائج والمناقشة	
31	..... مقدمة 1.III
31	..... تفاصيل الحساب 2.III
32	..... البنية البلورية لسبائك كامل هوسلر Full-Heusler 1.2.III
32	..... الخصائص البنيوية 3.III
32	..... دراسة استقرار المركبات في حالة المغناطيسية الحديدية واللامغناطيسية (NF/FM) 1.3.III
35	..... طاقة التماسك $E_{coh}$ و التكوين $E_{for}$ 2.3.III
36	..... طاقة التماسك $E_{coh}$ 1.2.3.III
36	..... طاقة التكوين (التشكُّل) $E_{for}$ 2.2.3.III
37	..... الخصائص الالكترونية 4.III
37	..... أحزمة الطاقة 1.4.III
40	..... كثافة الحالة DOS 2.4.III
45	..... الخصائص المغناطيسية 5.III
45	..... العزم المغناطيسي 1.5.III
48	..... المراجع
50	..... خاتمة عامة
	..... الملخص.

## قائمة الأشكال

الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل
الفصل الأول		
13	تمثيل الكمون " Muffin-Tin " MT.	(1.I)
الفصل الثاني		
21	العزم المغناطيسي للمواد: (1) Ferromagnétisme، (2) Antiferromagnétisme، (3) Ferrimagnétisme.	(1.II)
21	الجدول الدوري يوضح العناصر X، Y و Z التي تتشكل منها مركبات Heusler.	(2.II)
22	بنية سبيكة هوسلر من النوع full-Heusler $X_2YZ$ حيث: $X=•$ ، $Y=•$ و $Z=•$ .	(3.II)
24	بنية سبيكة هوسلر من النوع Half-Heusler XYZ حيث: $X=•$ ، $Y=•$ و $Z=•$ .	(4.II)
25	تمثيل تخطيطي لكثافات الحالات واستقطاب الدوران: (1) Non Ferromagnétisme، (2) Ferromagnétisme، (3) demi-métalliques.	(5.II)
26	صمام العزم المغزلي Vannes de spin.	(6.II)
الفصل الثالث		
33	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaVO_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في كلا الحالتين (NF/FM).	(1.III)
33	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaVS_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في كلا الحالتين (NF/FM).	(2.III)
34	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaMnO_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في كلا الحالتين (NF/FM).	(3.III)
34	تغيرات الطاقة الكلية للمركب $NaMnS_2$ في كلا الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ في كلا الحالتين (NF/FM).	(4.III)
38	أحزمة الطاقة للمركب $NaVO_2$ متضمنة نقاط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(5.III)
38	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnO_2$ متضمنة نقاط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(6.III)
39	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnS_2$ متضمنة نقاط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(7.III)
39	أحزمة الطاقة للمركب $NaMnS_2$ متضمنة نقاط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.	(8.III)
42	كثافة الحالة الكلية TDOS للمدارات للمركب $NaVZ_2$ ( $Z = 0, S$ ) والجزئية PDOS.	(9.III)
43	كثافة الحالة الكلية TDOS للمركب $NaVZ_2$ ( $Z = 0, S$ ) والجزئية PDOS المحسوب بواسطة GGA.	(10.III)
44	كثافة الحالة الكلية TDOS للمدارات للمركب $NaMnZ_2$ ( $Z = 0, S$ ) والجزئية PDOS.	(11.III)
45	كثافة الحالة الكلية TDOS للمركب $NaMnZ_2$ ( $Z = 0, S$ ) والجزئية PDOS المحسوبة بواسطة GGA.	(12.III)

## قائمة الجداول

الصفحة	عنوان الجدول	رقم الشكل
الفصل الثاني		
23	البنىات المختلفة لمركبات كامل هوسلر full-Heusler.	(1.II)
23	الاحتمالات المختلفة غير المكافئة في بنية $C_{1b}$ لسبيكة نصف هوسلر Half-Heusler.	(2.II)
23	البنىات المختلفة لمركبات كامل هوسلر Half-Heusler.	(3.II)
الفصل الثالث		
31	بيانات برنامج Wien2K لكل مركب.	(1.III)
32	تموضع الذرات لكل مركب في كل من الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ .	(2.III)
35	ثابت الشبكة البلورية $a(A^\circ)$ ، معامل الانضغاطية $B$ والمشتقة الأولى للمعامل الانضغاطية $B'$ لكل مركب في كل من الهيكلين $Hg_2CuTi$ و $Cu_2MnAl$ .	(3.III)
36	طاقة التماسك والتكوين (التشكّل) للمركبات الأربعة $NaMnZ_2$ ( $Z = O, S$ ) و $NaVZ_2$ ( $Z = O, S$ ).	(4.III)
45	قيم العزم المغناطيسي الكلي للمركبات الأربعة والجزئي لكل ذرة منه باستخدام تقريب GGA.	(5.III)

# مقدمة عامة

لقد عرفت فيزياء المواد تطوراً جدياً مهم في كل من المجال التجريبي والمجال النظري، فقد لعبت دوراً أساسياً في تطوير مجتمعنا الحديث من خلال ظهور العديد من التطبيقات التكنولوجية: الإلكترونيات، تخزين البيانات، المستشعرات، والاتصالات.

أدى البحث في مجال تكنولوجيا النانو وبشكل خاص الإلكترونيات الدقيقة وتخزين المعلومات إلى تطور الإلكترونيات من حيث تقليص في حجمها من أجل دمج العديد من الأجهزة مع بعضها البعض وبأقل تكلفة مع الزيادة في سرعة الأداء، فقد شهدت علوم النانو سنة 1988 ثورة علمية بعد اكتشاف المقاومة المغناطيسية العملاقة (GMR) من قبل Albert Fert في فرنسا و Peter Grunberg في ألمانيا [2،1]، يعرف هذا المجال بـ spintronic والذي يخضع لميكانيك الكم حيث يتم استغلال خاصية دوران الإلكترون بالإضافة إلى شحنته في نقل وتخزين المعلومات وتشفيرها [4،3].

نظراً للتطور الذي شهده مجال spintronic أصبح من أكثر المجالات استخداماً في تخزين البيانات وفي معالجتها بالإضافة إلى صمامات العزم المغزلي spin على أساس تأثير (GMR)، والتي تستخدم في المستشعرات المغناطيسية ورؤوس قراءة الأقراص الصلبة كما تم اكتشاف تأثيرات أخرى، مثل تأثير المقاومة المغناطيسية النفقية (TMR) [5].

من بين أهداف فيزياء المواد فهم الخصائص الفيزيائية للمادة (البنوية، الإلكترونية، الميكانيكية والضوئية) التي ترتبط ببنيتها. إن تحديد بنية المواد يسمح بتفسير النتائج التجريبية ومعرفة خصائصها الفيزيائية والكيميائية لأجل التأكد من المجال المناسب لتطبيقها. ففي السنوات الأخيرة اهتم الباحثين بالمحاكاة "التجربة الافتراضية" لأنها أقل تكلفة وسهلة التحقيق مقارنة بالتجربة الحقيقية، فقد أصبح من

الممكن الحصول نظريا على البنية الالكترونية لهذه المواد باستخدام المحاكاة الكمومية التي تتطلب التعريف الدقيق للنظام والتي تستند للمبادئ الاولي ab-initio ولأنها أكثر دقة وفعالية فقد اصبحت الاداة الاساسية لحساب الخصائص البنيوية والالكترونية .... للهياكل الاكثر تعقيدا والتي تعتمد على نظرية دالة الكثافة DFT [6،7] اساسها ان الطاقة الكلية للنظام ما تكون دالة للكثافة الالكترونية، والتي تركز على نظرية هوهنبارغ وكوهن [6]. لقد بنيت عليها العديد من الطرق من بينها طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW المدمجة في برنامج Wien2k.

حظيت مركبات هوسلر في السنوات الأخيرة بعد اكتشافها في سنة 1903 من طرف المهندس الألماني Friedrich Heusler [8] بالاهتمام من طرف الباحثين بسبب خصائصها الفيزيائية المختلفة [9]، والتي تعتبر من أكثر المواد اهمية في مجال الإلكترونيات [10]، البصريات، الموصلات الفائقة [11]، الطب الحيوي [12].

تتميز مركبات هوسلر بخاصية العزم المغزلي الالكتروني والتي تعد من أهم الخصائص المرغوبة في مجال الالكترونيات، هذه الخاصية هي السبب الرئيسي لاختيارنا لدراسة هذا النوع من المركبات.

الهدف من عملنا هو دراسة الخصائص البنيوية، والالكترونية، والمغناطيسية للسبائك التالية:  $\text{NaMnZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) و  $\text{NaVZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ )، لإنجاز هذا العمل اتبعنا الخطوات التالية:

الفصل الأول: الجانب النظري ويقدم نظرية دالية الكثافة (DFT) وتقريباتها، مبادئ طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW المدمجة في Wien2k.

الفصل الثاني: دراسة عامة حول المغناطيسية والمواد أنصاف المعادن ونركز تحديدا على سبائك هوسلر Heusler وخصائصها.

الفصل الثالث: عرض وتحليل ومناقشة النتائج المتحصل عليها، خاتمة عامة تلخص أهم النتائج في هذا العمل.

## قائمة المراجع

- [1] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett* 61, 2472 (1988).
- [2] G. Binash, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, *Phys. Rev. B* 39, 4828 (1989).
- [3] R. A. De Groot, F. M. Mueller, P. G. Van Engen, et K. H. J. Buschow, « New class of materials: half-metallic ferromagnets », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, no 25, p. 2024, 1983.
- [4] S. Parkin, X. Jiang, C. Kaiser, A. Panchula, K. Roche, et M. Samant, « Magnetically engineered spintronic sensors and memory », *Proc. IEEE*, vol. 91, no 5, p. 661-680, 2003.
- [5] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, *Phys Rev Lett*. 57, 1986.
- [6] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev. B* 136 (1964) 684.
- [7] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev. A* 140 (1965) 1133.
- [8] Claudia Felser . Atsufumi Hirohata Editors, *Heusler Alloys Properties, Growth, Applications*, Springer Series in Materials Science Volume 222, 2016.
- [9] J.Kübler, A.R.Williams and C.B.Sommers, *Phys.Rev*, B28, pp. 1745–1755, 1983.
- [10] D. Kieven, R. Klenk, S. Naghavi, C. Felser, et T. Gruhn, « I-II-V half-Heusler compounds for optoelectronics: Ab initio calculations », *Phys. Rev. B*, vol. 81, no 7, p. 075208, 2010.
- [11] S. Sakurada et N. Shutoh, « Effect of Ti substitution on the thermoelectric properties of (Zr, Hf) NiSn half-Heusler compounds », *Appl. Phys. Lett.*,

vol. 86, no 8, p. 082105, 2005.

- [12] A. Birsan et V. Kuncser, « Zr-Based Heusler Compounds for Biomedical Spintronic Applications », in *Magnetic Materials and Magnetic Levitation* , IntechOpen, 2020, p. 89.

الفصل الأول

**DFT** نظرية دالية الكثافة

## 1.1. مقدمة

تلعب فيزياء المواد دورًا مهمًا في التطبيقات التكنولوجية وذلك بفضل معرفة الخصائص الإلكترونية، حيث أصبح من الممكن الحصول على معلومات حول الخصائص (الهيكليّة والميكانيكية والكهربائية والاهتزازية والحرارية)، وذلك بدراسة حركة الإلكترونات والانبوية التي تشكل نظامًا متعدد الجسيمات شديد التفاعل، وتم التعبير عنها بعبارة رياضية من طرف العالم اروين شرودنجر "معادلة شرودنجر" تعرف بدالة الموجة (أن لكل جسيم دالة موجة خاصة به) وهي اساس ميكانيك الكم، وللأسف فإن الانتقال من نظام أحادي الإلكترون إلى نظام متعدد الإلكترونات يجعل الحل المباشر لمعادلة شرودنجر أكثر تعقيدًا [1]، وبالتالي كان من الضروري البحث عن أشكال أخرى تحاول وصف خصائص النظام بشكل أفضل وذلك عن طريق حل معادلة شرودنجر. في هذا الفصل سوف نقوم بتقديم مجموعة من التقريبات المختلفة لإعطاء حل لمعادلة شرودنجر ولأي نظام ذري بسيط أو معقد. فيما يلي، نقدم معادلة شرودنجر والتقريبات المختلفة قبل ظهور DFT التي أثبتت نجاحها الكبير في معرفة الخصائص المختلفة للمواد (الهيكليّة، المرورية، الديناميكية الحرارية).

## 2.1. معادلة شرودنجر Schrödinger

يمكن وصف الخصائص الفيزيائية للمادة من خلال سلوك مكوناتها "الإلكترونات والنواة"، يعتمد الوصف الدقيق لأي نظام مجهري على حل المعادلة المستقلة عن الزمن التي وضعها Erwin Schrödinger، والتي تكتب من الشكل التالي:

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

H هاميلتونيان

$\Psi$  دالة الموجة

E طاقة النظام

هاميلتونيان نظام بلوري المكون من عدد كبير من الجسيمات المتفاعلة فيما بينها، "الإلكترونات والنواة" عبارة عن مجموع الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل بينها، وفي غياب التفاعل مع الحقل الخارجي ويكتب:

$$H = T_e + T_n + V_{n-n} + V_{n-e} + V_{e-e} \quad (2.I)$$

حيث:

$$T_e = - \sum_i^{N_e} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$$

الطاقة الحركية للإلكترونات.

$$T_n = - \sum_I^N \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2$$

الطاقة الحركية للأنوية.

$$V_{n-n} = \sum_{I=1}^N \sum_{J>I}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$$

الطاقة الكامنة للتفاعل بين الأنوية.

$$V_{n-e} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|}$$

الطاقة الكامنة للتفاعل نواة-إلكترون.

$$V_{e-e} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

الطاقة الكامنة للتفاعل بين الإلكترونات.

يمكن إيجاد حلول للمعادلة (1.I) في حالة ذرة الهيدروجين فقط، أما في حالة نظام متعدد الإلكترونات، بسبب التفاعلات الإلكترونية، لا يوجد حل دقيق لمعادلة شرودنغر. من أجل إيجاد حلول تقريبية المقبولة، نحتاج إلى إجراء تقريبات. التقريب الأول الذي يمكن تقديمه هو تقريب بورن-أوبنهايمر Born-Oppenheimer [2].

### 3.I. تقريب بورن-أوبنهايمر Born-Oppenheimer

يسمى التقريب الأدياباتيك الكاظم، اقترحه العالمان بورن وأوبنهايمر سنة 1927. يأخذ هذا التقريب بعين الاعتبار الفرق في الكتلة بين الإلكترونات والنواة، حيث كتلة النواة أكبر بكثير من كتلة الإلكترونات،

بالتالي سرعة الإلكترونات أكبر من سرعة النواة، وبهذا يمكن إهمال حركة النواة مقارنة مع حركة الإلكترونات ونعتبرها ساكنة. [3]

$$H_{\text{noyau}} = T_n + T_{n-n} \simeq V_{n-n} \quad \text{و} \quad H_{\text{elec}} = T_e + T_{n-e} + V_{e-e} \quad (3.I)$$

هذا التقريب سهل مشكلة الجسيمات المتعددة، إلا أن الإلكترونات لا تتحرك بشكل مستقل عن بعضها البعض بسبب وجود تفاعلات قوية بين الإلكترونات. لذلك هناك حاجة إلى تقريب آخر يسمى تقريب هارترى Hartree. [4]

#### 4.I. تقريب هارترى Hartree

يعرف بتقريب الحقل المتوسط، يعتمد هذا التقريب الذي قدمه Hartree في عام 1928 على نموذج الإلكترون المستقل، يتحرك كل إلكترون في حقل متوسط متولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى في النظام. [5] وبالتالي يصبح من الممكن وصف دالة الموجة للنظام الإلكتروني بجاء دوال الموجة الأحادية الإلكترونية حيث:

$$\Psi_{\text{approchée}} = \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(r_2) \dots \psi_N(r_N) \quad (4.I)$$

اعتمد هذا التقريب على افتراض أن الإلكترونات حرة غير مرتبطة، وبالتالي هذه الصعوبة في وصف

تفاعل الإلكترونات تقتضي المرور بتقريبات أخرى تقريب هارترى-فوك Hartree-Fock

#### 5.I. تقريب هارترى-فوك Hartree-Fock

أضاف فوك [6]، تحسين على تقريب هارترى وذلك بإضافة مبدأ الغزل لنظام إلكتروني (الذي يمنع إلكترونين من نفس الغزل من التواجد في نفس الحالة الكمية) بحيث يوجد  $N!$  احتمال لوضع  $N$  إلكترون على  $N$  موضع وبالتالي يتم استبدال دالة الموجة الكلية بمحدد سلايتر [7].

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1)\psi_1(\vec{r}_2)\dots\dots\dots\psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\dots\dots\psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1)\psi_N(\vec{r}_2)\dots\dots\dots\psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (5.I)$$

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$  : ثابت التعامد (التوحيد) [8]

يهمل هذا التقريب تفاعلا كيميا هاما وهو طاقة الارتباطات بين الالكترونات ذات الغزل المتعاكسة،

للتغلب على هذه الصعوبة وجدت طريقة تعرف بنظرية دالة الكثافة. [9]

## 6.I. نظرية دالة الكثافة Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

يعود أصلها الى الاعمال الاساسية لتوماس (Thomas) [10] وفيرمي (Fermi) 1927 [11]، ان

مبدأ نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) هو التعبير عن نظام متعدد الإلكترونات بدلالة الكثافة الإلكترونية  $\rho(\mathbf{r})$  والتخلي عن دالة الموجة من أجل حساب الطاقة [12]. سمحت هذه النظرية بتبسيط معادلة شرودينغر وأصبح

من الممكن التعبير عن الطاقة الكلية لنظام الكتروني بدلالة كثافته حيث:

$$E = E(\rho) \quad (6.I)$$

### 1.6.I. نظرية هوهانبرغ-كوهن Hohenberg-Kohn

في عام 1964 قام كل العالمان هوهانبرغ-كوهن بوضع القاعدة الأساسية لنظرية دالة الكثافة، يمكن

تطبيقها على أي نظام به عدة جسيمات متفاعلة في كمون خارجي. [13] تعتمد على نظريتين:

**النظرية الاولى:** الطاقة الكلية لنظام به عدة جسيمات متفاعلة في كمون خارجي  $V_{ext}(\vec{r})$  للأنوية، على أنها

دالة وحيدة للكثافة الإلكترونية  $\rho(\mathbf{r})$  أي انه يمكن معرفة خصائص نظام اذا تمت معرفة الكثافة الإلكترونية.

حيث:

$$E[\rho] = T_e[\rho] + V_{ee}[\rho] + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} \quad (7.I)$$

$$F_{HK}[n(\vec{r})] = T_e[n(\vec{r})] + V_{ee}[n(\vec{r})] \quad (8.I)$$

$F_{HK}[\rho_{fond}]$ : دالة هوهانبرغ-كوهن.

$T[\rho]$ : الطاقة الحركية.

$V[\rho]$ : طاقة التفاعل بين الكترون-الكترن.

**النظرية الثانية:** بين هوهانبرغ-كوهن أن الحد الأدنى للطاقة الكلية للنظام يتوافق مع الكثافة الإلكترونية للحالة

الأساسية حيث:

$$E(\rho_0) = \min E[\rho] \quad (9.I)$$

$\rho_0$ : الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية. [14]

### 2.6.I معادلة كوهن-شام Kohn-Sham

في عام 1965 اقترح كل من كوهن ولو شام طريقة لاستخدام نظرية الكثافة الوظيفية [15] تركز على

تحويل الالكترونات المتفاعلة ضمن كمون خارجي الى جملة افتراضية غير متفاعلة تتحرك فيها الالكترونات

ضمن كمون كوهن-شام الناشئ عن جميع الأنوية والالكترونات الاخرى لها نفس الكثافة تعطى طاقة كوهن

شام بالعلاقة التالية:

$$E[\rho(r)] = T_0[\rho(r)] + V_H[\rho(r)] + V_{xc}[\rho(r)] + V_{ext}[\rho(r)] \quad (10.I)$$

$T_0[\rho(r)]$ : الطاقة الحركية للجسيمات الوهمية دون تفاعل.

$$V_H[\rho(r)]: \text{كمونات هاتري وتعطى بالعلاقة: } V_H = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} d^3r'$$

$V_{ext}[\rho(r)]:$  كمون الانوية.

$V_{xc}[\rho(r)]:$  كمون التبادل والترابط. [16]

## 3.6.I. طاقة التبادل والارتباط

يتمثل النقص الرئيسي في طريقة كوهن-شام هو غموض عبارة كمون تبادل ارتباط ما يجعل حل المعادلات صعبا نوعا ما، لذلك مر كمون تبادل ارتباط بالعديد م العمليات التقريبية، لكن لحد الآن لم يتم التوصل الى الشكل الدقيق لهذا الكمون. نذكر أهم التقريبات:

## 1.3.6.I. تقريب كثافة الموضع (LDA) Approximation de la densité locale

طرح هذا التقريب من طرف كوهن وشام، الفكرة الأساسية لهذا التقريب هي اعتبار لنظام الالكترونات اللامتجانس كنظام متجانس محليا [17]. تكتب طاقة التبادل ارتباط بالعلاقة التالية:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}^{hom} \rho(r) d^3r \quad (11.I)$$

$E_{xc}^{LDA}[\rho]$  : طاقة تبادل-ارتباط لجسيمات غاز الإلكترون المتجانس (المنتظم).

يمكن تقسيم طاقة التبادل ارتباط الى طاقة التبادل  $\varepsilon_x$  وطاقة الارتباط  $\varepsilon_c$

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \{ \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(r)] + \varepsilon_x^{hom}[\rho(r)] \} d^3r \quad (12.I)$$

نعلم أنه في الأنظمة الحقيقية الكثافة الإلكترونية لا تكون منتظمة موضعيا ولذا التقريب لا يستعمل إلا

في حالة غاز إلكتروني منتظم لهذا السبب يستعمل تقريب آخر يأخذ بعين الاعتبار عدم التجانس في الكثافة الالكترونية يعرف بتقريب التدرج المعمم GGA.

## 2.3.6.I. تقريب التدرج المعمم (GGA) Approximation du gradient généralisé

تقريب التدرج المعمم هي تحسين لتقريب كثافة الموضع يأخذ بعين الاعتبار عدم التجانس في الكثافة

الالكترونية  $\rho(r)$  عبر تدرجها  $\nabla\rho(\vec{r})$  [18] نكتب عبارة الطاقة بالشكل التالي:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int f_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})] d^3r \quad (13.I)$$

$\nabla\rho(\vec{r})$  : تدرج الكثافة الالكترونية.

F: دالة الكثافة المحلية يسمى معامل تحسين يعتمد اساسا GGA على المستعملة.

## 7.I. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل

في إطار نظرية دالة الكثافة تعتبر طريقة الامواج المستوية المتزايدة الأكثر دقة لحساب البنية

الالكترونية للمواد الصلبة، والتي تعتبر الطريقة الفعالة لحل معادلة كوهن شام [19].

### 1.7.I. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة

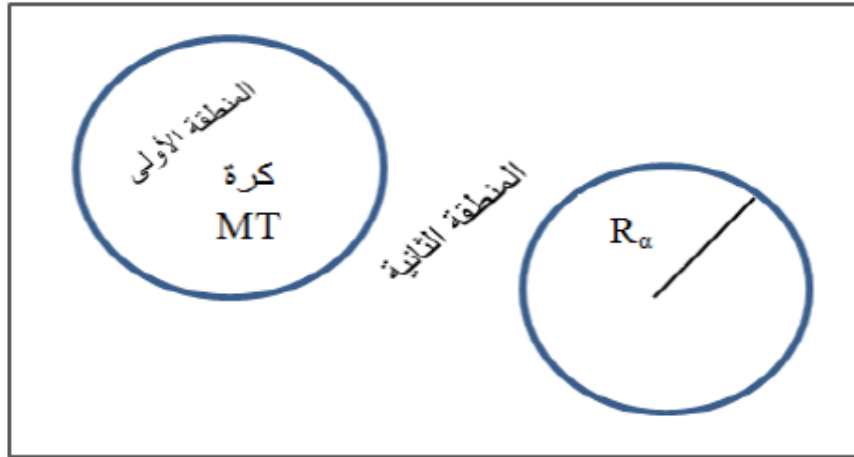
في عام 1937 نشر سليتر طريقة الامواج المستوية المتزايدة (APW) [20]، ثم عرض اندرسون

(Andersen) [21]، طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (LAPW) وهي تطوير لطريقة سليتر (APW)،

اعتبر سليتر أنه في محيط النواة الذرية، تكن كمونات ودوال الموجة على شكل كمون " Muffin-Tin " MT

الذي يوجد به تناسق كروي داخل المجال MT من دائرة نصف قطرها  $R_\alpha$  الذي يقسم الفضاء المحيط بالذرات

الى منطقتين الشكل (1.I).



الشكل (1.I): تمثيل الكمون " Muffin-Tin " MT.

المنطقة الأولى: داخل الكرة MT حيث تحاط كل ذرة بكرة ( $\alpha$  ذرة  $\alpha$  تحيط بها كرة نصف قطرها  $R_\alpha$ ) وتشمل كل

من الانوية والإلكترونات شديدة الارتباط بها.

المنطقة الثانية: المنطقة البينية التي تحيط بالكرات، او الفضاء غير المشغول بالكرات، وتشمل الالكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية.

### 2.7.I. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا

طريقة *Linearized Augmented Plane Wave (LAPW)* تم تطويرها من قبل اندرسون (Andersen) [21] [22] تكون الدالة الأساسية داخل كرة "Muffin-Tin" على شكل ترتيبات خطية للدالة القطرية ومشتقاتها بالنسبة للطاقة.

في مايلي نلخص اجابيات طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا بالنسبة لطريقة الموجة المستوية المتزايدة:

✓ يمكن الحصول على شرائط الطاقة لعدد نقاط لموجي  $K$  في منطقة بريلوان الاولى في الفضاء المعكوس، لكن في طريقة الموجة المستوية المتزايدة نحسب طاقة كل شريط.

✓ نقص زمن الحساب في حساب شرائط الطاقة في طريقة LAPW وبالتالي فهي أسرع كثيرا مقارنة

بطريقة APW .

✓ التقارب أصبح سريع في طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا مقارنة مع طريقة الموجة المستوية

المتزايدة APW.

### 3.7.I. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا ذات الكمون الكامل FP-LAPW

FP-LAPW "Full Potential Linearized Augmented Plane Waves" [23] تكون الدالة

الأساسية داخل كرة "Muffin-Tin" هي مجموعات خطية من الدوال الشعاعية ومشتقاتها، وتعتبر موجات

مستوية في المنطقة البينية، تضمن هذه الطريقة استمرارية دالة الموجة على سطح الكرة MT تحليلها يعطى بالعلاقة التالية:

$$V(r) = \begin{cases} \sum_k V_k e^{ikr} & r > R_\alpha \\ \sum_{\ell m} V_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (14.I)$$

بنفس الطريقة، تعطى كثافة الشحنة بالشكل:

$$\rho(r) = \begin{cases} \sum_k \rho_k e^{ikr} & r > R_\alpha \\ \sum_{\ell m} \rho_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (15.I)$$

### 8.I برنامج Wien2k

هو برنامج حاسوبي يستعمل لإجراء الحسابات تحت إطار نظرية DFT، يعتمد مبدأ عمله على طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً والكمون الكامل FP-LAPW، تم تعميم هذا البرنامج وتطويره بمعهد "كيمياء المواد" في الجامعة التقنية في فيينا من طرف Blaha P و Schwartz K و Sorintin P سنة 1990 [24]. يسمح هذا البرنامج بدراسة خواص البلورات [25]، أنظمة النواقل الفائقة عالية الحرارة، المعادن، الاسطح المعدنية الانتقالية [26]، الجزيئات [27].

## قائمة المراجع

- [1] pinciples, application and analysis, Joseph Morin and Jean Marie, Pelletier editors  
copyright © 2013 by Nova Science Publishers, Inc.
- [2] M. Born, R. J. Oppenheimer, « Zur Quant en théorie der Molekeln ». Ann. Phys  
84, 457, 1927.
- [3] J.P.Perdew,J.A. Chevary, S.H.Vosko, K.A. Jackson, M.R.Pederson, D.J.Singh,  
and C. Fiolhais, phys.Rev.B46, 6671, 1992.
- [4] M. Born, R. Oppenheimer, Ann.Physik, 84, 457, 1927.
- [5] D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, 89, 1928.
- [6] V. Fock, Z. Phys. 61, 126, 1930.
- [7] J. C. Slater, Phys. Rev. 34, 1293, 1929.nv
- [8] P.-O. Löwdin, Advan. Chem. Phys, 210, 1958.
- [9] W.Kohn and L.J.Sham, Self-consistent Equation Including Exchange and  
Correlation Effects, phys. Rev, 140, A1133, 1965.
- [10] L. H. Thomas, Proc. Cambridge. Phlis. Soc. 23, 542, 1928.
- [11] E. Z. Fermi, *Phys. Rev.* 48, 73, 1928.
- [12] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B136, 864, 1964.nv
- [13] T.I.Gilbert Hohnberg Kohn theorem for nonlocal external potential phys.Rev,  
B 2111, 1974.
- [14] Paul W.Ayers Axiomatic formulation of the Hohenberg-Kohn functional  
Physical eviewv, A73, 012513, 2006.
- [15] Dr. Reiner M.Dreizler, Dr. Eberhard K. U. Gross, Density Functional Theory  
An Approach to the Quantum Many-Body Problem; 1990
- [16] L. S. Sham and W. Kohn, Phys. Rev. 145, 561, 1966.
- [17] J.P. Perdew, W. Wang, Phys. Rev. B 45, 13, 244, 1992.
- [18] J.P.Perdew, K.Burke, and M.Ernzerhof.Phys. Rev. Lett, 77, 3865, 1996.

- [19] W. Kohn et L. J. Sham, « Self-consistent equations including exchange and correlation effects », *Physical review*, vol. 140, no 4A, p. A1133, 1965.
- [20] J. C. Slater, « Wave functions in a periodic potential », *Physical Review*, vol. 51, no 10, p. 846, 1937.
- [21] O. K. Andersen, « Linear methods in band theory », *Physical Review B*, vol. 12, no 8, p. 3060, 1975.
- [22] K. Schwarz, « DFT calculations of solids with LAPW and WIEN2k », *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 176, no 2, p. 319-328, 2003.
- [23] D. Hamann, « Semiconductor charge densities with hard-core and soft-core pseudopotentials », *Physical Review Letters*, vol. 42, no 10, p. 662, 1979.
- [24] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey, Full-potential, linearized augmented plane wave programs for cristalline systems, *Comput. Phys. Commun.* 59, pp. 399-438, 1990.
- [25] P. Dufek, P. Blaha, et K. Schwarz, « Determination of the nuclear quadrupole moment of  $^{57}\text{Fe}$  », *Physical review letters*, vol. 75, no 19, pp. 3545, 1995.
- [26] K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, *Phys. B* 42, pp. 2051-2061, 1990.
- [27] B. kohler, P. Ruggerone, S. Wilke, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* 74, 1387, 1995.

## الفصل الثاني

عموميات حول سبائك Heusler

## مقدمة

أدى البحث عن مواد جديدة في مجال الإلكترونيات إلى اكتشاف فئة من المركبات تسمى مركبات Heusler، أصبحت المواد المفضلة للعديد من التطبيقات نظرًا لبنيتها الإلكترونية القابلة للضبط، بالإضافة إلى أنها تتمتع بالعديد من الخصائص الفيزيائية المختلفة [1]، وتعد من أكثر المواد تنوعًا التي يمكن تطبيقها في الإلكترونيات والتي أصبحت أساسية في مجال تخزين المعلومات ونقلها حيث تم اكتشاف تأثير المغناطيسية العملاقة من قبل Albert Fert و Peter Grunberg في عام 1988. أحدث هذا الاكتشاف ثورة في مجال تكنولوجيا المعلومات [2،3]، في هذا الفصل سوف نتعرف أكثر على سبائك Heusler وخصائصها التي تجعلها من أفضل المرشحين للاستخدام في مجال الإلكترونيات Spintronics.

## 1.1.II تصنيف المواد المغناطيسية

تتأثر جميع المواد بوجود عزم مغناطيسي بحيث يمكن للمادة أن تظهر أشكالًا مختلفة من المغناطيسية اعتمادًا على درجة حرارتها متغيرات أخرى (الضغط والحقل المغناطيسي الخارجي)، ويمكن تصنيفها حسب خواصها المغناطيسية إلى مايلي:

## 1.1.II Diamagnétiques مواد

هي مواد لا تمتلك عزم مغناطيسي حيث عند تطبيق مجال مغناطيسي H فان هذه الاخيرة تكتسب عزمًا مغناطيسيًا في الاتجاه المعاكس لاتجاه المجال المغناطيسي H. تتميز هذه المواد بقابلية مغناطيسية سلبية وهي مستقلة عن المجال. في الواقع، يقدم أي جسم استجابة مغناطيسية، ومع ذلك، فإن هذا الأخير غالبًا ما يكون ضئيلاً مقارنة بأشكال المغناطيسية الأخرى، كما أن خواصها المغناطيسية لا تتأثر بتغير درجة الحرارة. من بين هذه المواد (الفضة، الزئبق... الخ). [4]

**2.1.II. Paramagnétisme مواد**

هي مواد لها عزم مغناطيسي غير منظم في حالة تطبيق حقل مغناطيسي، بحيث هذا الخير له نفس اتجاه المجال المغناطيسي. تتميز هذه المواد بقابلية مغناطيسية موجبة. من بين هذه المواد (الألومنيوم، المنغنيز...الخ).

**3.1.II. Ferromagnétisme مواد**

هي مواد تتميز بمغطة ذاتية (عدم وجود مجال مغناطيسي خارجي)، كما لها نفاذية مغناطيسية عالية  $\mu_r \gg 1$ . تنشأ هذه المغطة الذاتية من تفاعل ثنائيات القطب المغناطيسية حيث يمكن لهذه الثنائيات أن تنتظم في اتجاه واحد وفي غياب حقل مغناطيسي خارجي حيث يكون لها عزم مغناطيسي كلي غير معدوم من بين هذه المواد (النيكل، الكوبالت، الحديد.....).

لقد بينت النظرية الكمية فيما بعد أن المغطة الذاتية تنشأ عن التفاعل السبيني المتبادل بين ذرات أو جزيئات المادة بسبب مبدأ باولي.

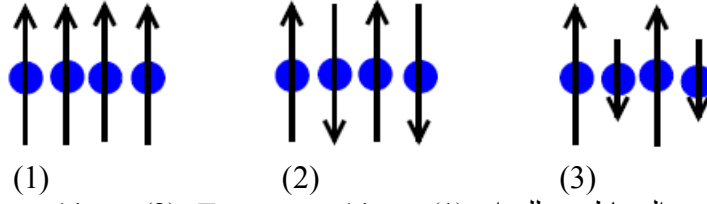
**4.1.II. Ferrimagnétisme مواد**

هي مواد تتكون من شبكتين فرعيتين حيث أن العزم المغناطيسي لنصف عدد الذرات في المادة يكون اتجاهه عكسي بالنسبة للنصف الاخر من الذرات، لكن عزومها المغناطيسية غير متساوية وبالتالي العزم المغناطيسي الكلي غير معدوم.

**5.1.II. Antiferromagnétisme مواد**

هي مواد تتكون من شبكتين فرعيتين حيث أن العزم المغناطيسي لنصف عدد الذرات في المادة يكون اتجاهه عكسي بالنسبة للنصف الاخر من الذرات، لكن عزومها المغناطيسية متساوية وبالتالي العزم المغناطيسي الكلي معدوم، تتميز بدرجة حرارة تدعى درجة حرارة نييل  $T_N$  وهي الحد الفاصل بين الطور المغناطيسي والطور اللامغناطيسي [4]. (الشكل II.1) يوضح العزم المغناطيسي للمواد

Ferrimagnétisme ،Antiferromagnétisme و Ferromagnétisme



الشكل 1.II: العزم المغناطيسي للمواد: (1) Ferromagnétisme، (2) Antiferromagnétisme، (3) Ferrimagnétisme

## 2.II. سبائك Heusler

منذ اكتشاف أنصاف المعادن المغناطيسية لسبائك Heusler، أصبحت مجالاً من مجالات الاهتمام البحثي لتطبيقات الإلكترونيات. يعود أول اكتشاف لسبائك Heusler إلى عام 1903 من قبل المهندس الألماني Friedrich Heusler أثناء عمله على سبيكة لـ  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  التي تتصرف مثل مادة مغناطيسية حديدية بينما عناصرها الخاصة ليست مواد مغناطيسية في حد ذاتها [5]. في عام 1963، أثبت أن ذرة المنغنيز هي المساهمة الرئيسية في العزم المغناطيسي لسبائك  $\text{Cu}_2\text{MnSb}$  [6]، يمكن أن يكون لهذه المركبات خصائص أنصاف المعادن، أشباه الموصلات والموصلات الفائقة [7] (الشكل 2.II).

ATOMIC NUMBER		SYMBOL		ELECTRONEGATIVITY		Full Heusler		Half Heusler	
1	H	2.20							
2	He								
3	Li	0.98							
4	Be	1.57							
5	B	2.04							
6	C	2.55							
7	N	3.04							
8	O	3.44							
9	F	3.98							
10	Ne								
11	Na	0.93							
12	Mg	1.31							
13	Al	1.61							
14	Si	1.90							
15	P	2.19							
16	S	2.58							
17	Cl	3.16							
18	Ar								
19	K	0.82							
20	Ca	1.00							
21	Sc	1.38							
22	Ti	1.54							
23	V	1.63							
24	Cr	1.66							
25	Mn	1.55							
26	Fe	1.83							
27	Co	1.88							
28	Ni	1.91							
29	Cu	1.90							
30	Zn	1.65							
31	Ga	1.81							
32	Ge	2.01							
33	As	2.18							
34	Se	2.55							
35	Br	2.96							
36	Kr	3.00							
37	Rb	0.82							
38	Sr	0.95							
39	Y	1.22							
40	Zr	1.33							
41	Nb	1.60							
42	Mo	2.16							
43	Tc	1.90							
44	Ru	2.20							
45	Rh	2.28							
46	Pd	2.20							
47	Ag	1.93							
48	Cd	1.69							
49	In	1.78							
50	Sn	1.96							
51	Sb	2.05							
52	Te	2.10							
53	I	2.66							
54	Xe	2.60							
55	Cs	0.79							
56	Ba	0.89							
57-71	LANTHANIDE								
72	Hf	1.30							
73	Ta	1.50							
74	W	1.70							
75	Re	1.90							
76	Os	2.20							
77	Ir	2.20							
78	Pt	2.20							
79	Au	2.40							
80	Hg	1.90							
81	Tl	1.80							
82	Pb	1.80							
83	Bi	1.90							
84	Po	2.00							
85	At	2.20							
86	Rn								
87	Fr	0.70							
88	Ra	0.90							
89-103	ACTINIDE								
57	La	1.10							
58	Ce	1.12							
59	Pr	1.13							
60	Nd	1.14							
61	Pm	1.13							
62	Sm	1.17							
63	Eu	1.20							
64	Gd	1.20							
65	Tb	1.10							
66	Dy	1.22							
67	Ho	1.23							
68	Er	1.24							
69	Tm	1.25							
70	Yb	1.10							
71	Lu	1.27							
89	Ac	1.10							
90	Th	1.30							
91	Pa	1.50							
92	U	1.70							
93	Np	1.30							
94	Pu	1.28							
95	Am	1.13							
96	Cm	1.28							
97	Bk	1.30							
98	Cf	1.30							
99	Es	1.30							
100	Fm	1.30							
101	Md	1.30							
102	No	1.30							
103	Lr	1.30							

الشكل 2.II: الجدول الدوري يوضح العناصر X، Y و Z التي تتشكل منها مركبات Heusler

## 1.2.II. البنية البلورية

يمكن تصنيف سبائك Heusler وفقاً لتركيبها الكيميائي الى عائلتين رئيسيتين:

## 1.1.2.II. Full-Heusler كامل هوسلر

صيغتها الكيميائية من النوع  $X_2YZ$  ، حيث  $X$  و  $Y$  عبارة عن معادن انتقالية و  $Z$  عنصر من المجموعات III إلى V في الجدول الدوري (الشكل.2.II)، هيكلها من النوع  $L_2$  (المجموعة الفضائية  $Fm\bar{3}m$   $n^\circ 225$ ) في بنية مكعبة fcc ( مكعب متمركز الأوجه) من النوع  $Cu_2MnAl$  كنموذج اولي، يتبلور هذا النوع بشكل عام في هيكلين:

(1) الهيكل الاول: مكعب عادي من النوع  $Cu_2MnAl$  كنموذج اولي (المجموعة الفضائية

$Fm\bar{3}m$   $n^\circ 225$ ) و [8,9]. حيث تأخذ الذرات  $X$  الموضع  $8c$   $(1/4, 1/4, 1/4)$ ، بينما الذرات

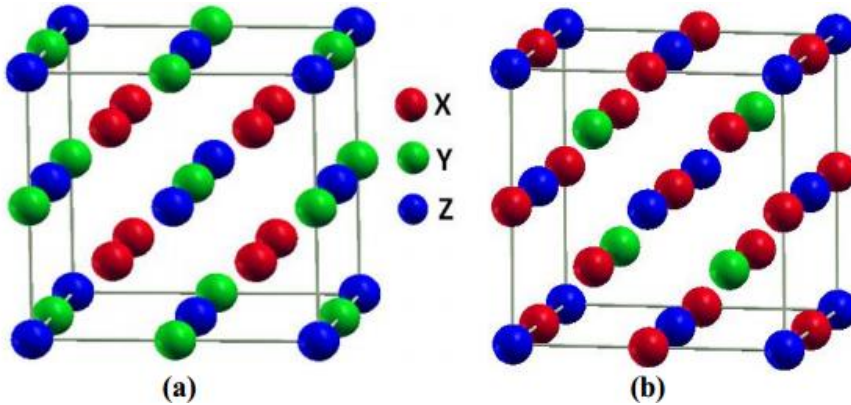
$Y$  و  $Z$  تأخذ الموضع  $4a$   $(0, 0, 0)$  و  $4b$   $(1/2, 1/2, 1/2)$  على الترتيب [10].

(2) الهيكل الثاني: مكعب عكسي من النوع  $Hg_2CuTi$  (المجموعة الفضائية  $F\bar{4}3m$   $n^\circ 216$ )

حيث أن العدد الذري للذرة  $X$  أقل من العدد الذري للذرة  $Y$  [11]، حيث تأخذ الذرات  $X$  الموضع

$4b$   $(1/2, 1/2, 1/2)$  و  $4d$   $(3/4, 3/4, 3/4)$ ، بينما تأخذ الذرات  $Y$  و  $Z$  الموضع

$4c$   $(1/4, 1/4, 1/4)$  و  $4a$   $(0, 0, 0)$  على الترتيب.



الشكل 3.II: يمثل بنية سبيكة هوسلر من النوع full-Heusler  $X_2YZ$  حيث: (a) مكعب عكسي و (b) مكعب عادي.

(الجدول 1.II) يوضح البنيات المختلفة لمركبات كامل هوسلر [12].

جدول 1.II: البنيات المختلفة لمركبات كامل هوسلر full-Heusler.

Z=Y=X'=X	Z=X', Y=X	Z=Y, X'=X	Z, Y=X'=X	Z, Y=X', X	Z, Y, X', X	الموقع المشغول الشكل العام
X <sub>4</sub>	X <sub>2</sub> X' <sub>2</sub>	X <sub>2</sub> Y <sub>2</sub>	X <sub>3</sub> Z	XX' <sub>2</sub> Z	XX'YZ	
Im $\bar{3}$ m-229	Fd $\bar{3}$ m-227	Pm $\bar{3}$ m-221	Fm $\bar{3}$ m-225	F $\bar{4}$ 3m- 216	F $\bar{4}$ 3m- 216	المجموعة الفضائية

### 2.1.2.II نصف هوسلر Half-Heusler

صيغتها الكيميائية من النوع XYZ [8,9]. تتبلور في بنية مكعبة fcc غير متماثلة هيكلها من

النوع C<sub>1b</sub> و LiAlSi كنموذج اولي (المجموعة الفضائية 216<sup>o</sup>, F $\bar{4}$ 3m). حيث تأخذ الذرات X, Y

و Z المواضع 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2) و 4c (1/4, 1/4, 1/4)، يتوافق هذا النوع مع سبيكة

كامل هوسلر X<sub>2</sub>YZ حيث يتم ازالة ذرة واحدة X من الاثنتين من الخلية الأولية [11].

الجدول التالي يوضح الترتيبات الذرية الثلاثة غير المتكافئة الممكنة لهذا النوع من البنيات (جدول 2.II)

[8].

جدول 2.II: الاحتمالات المختلفة غير المكافئة في بنية C<sub>1b</sub> لسبيكة نصف هوسلر Half-Heusler

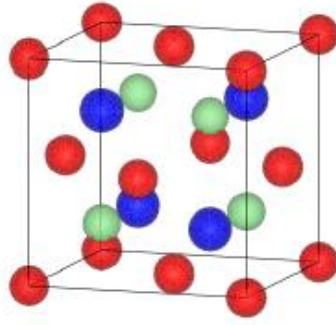
4c	4b	4 a	نوع البنية
Z	Y	X	I
Y	X	Z	II
X	Z	Y	III

التركيب البلوري الموصوف سابقاً لهذه السبائك هو ترتيب ذري، واي تغيير في التراس يمكن أن يؤدي إلى

ظهور بنية الكترونية بخصائص جديدة. (جدول 2.II) يوضح البنيات المختلفة لمركبات نصف هوسلر [13]

جدول 3.II: البنيات المختلفة لمركبات كامل هوسلر Half-Heusler.

4d=4b=4c=4a	4d=4b, 4c=4a	4d=4c, 4b=4a	4c, 4b=4a	4c, 4b, 4a	الموقع المشغول الشكل العام
X	YZ	XZ	XZ <sub>2</sub>	XYZ	
Im $\bar{3}$ m-229	Fd $\bar{3}$ m-227	Pm $\bar{3}$ m-221	Fm $\bar{3}$ m-225	F $\bar{4}$ 3m- 216	المجموعة الفضائية

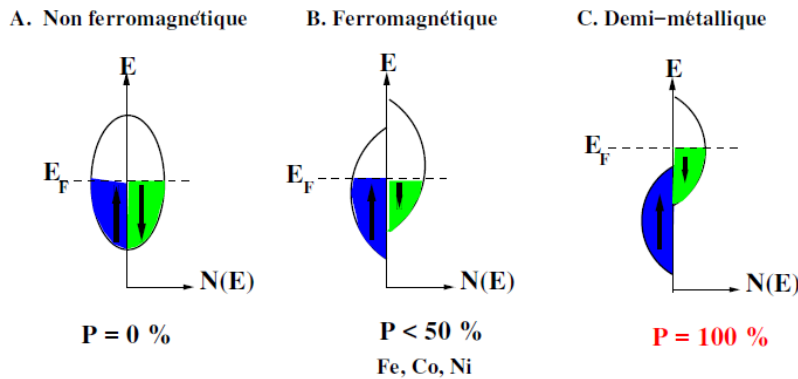


الشكل 4.II: يمثل بنية سبيكة هوسلر من النوع Half-Heusler XYZ حيث: X= • ، Y= • و Z= • [14]

### 3.II. المواد نصف معدنية demi-métalliques

يعود ظهور مصطلح نصف المعدن لأول مرة إلى بداية الثمانينيات بواسطة العالم Groote من أجل وصف بنية سبائك Heusler، حيث أن أصل المواد نصف معدنية ناتجة عن التهجين بين أشباه الموصلات والعوازل. [15] وهو مادة تتصرف مثل المعدن في اتجاه دوران واحد (spin up أو spin down) ومثل عازل كهربائي أو شبه موصل في الاتجاه الآخر أي به فجوة عند مستوى فيرمي في هذه الحالة، يكون الاستقطاب كلياً ويساوي 100%. (الشكل 5.II) [16].

تم اكتشاف هذه الخاصية عن طريق إجراء حسابات النطاق على مركبات عائلة half-Heusler وعلى وجه الخصوص على المركب NiMnSb، مما يجعل هذا المركب أول نصف معدن تتنبأ به حساب بنية النطاق [17، 18]. جعل هذا الاكتشاف من الممكن إطلاق نشاط بحثي لاكتشاف مواد شبه معدنية جديدة.



الشكل 5.II: تمثيل تخطيطي لكثافات الحالات واستقطاب الدوران: (A) Non Ferromagnétisme، (B) Ferromagnétisme، (C) demi-métalliques

## 4.II. تطبيقات سبائك Heusler

حظيت سبائك هوسلر في العقد الأخير باهتمام كبير بسبب خصائصها المختلفة التي لا توجد في الكثير من السبائك والتي تعد ضرورية للعديد من التطبيقات التكنولوجية، ومن بين أكثر المواد تنوعاً التي يمكن استخدامها في أجهزة تخزين الطاقة والذاكرة [3]، من بين هذه التطبيقات:

### 1.4.II. تطبيق سبائك هوسلر في الإلكترونيات (Spintronics)

تعتمد الأجهزة الإلكترونية التقليدية على نقل حاملات الشحنة الكهربائية، والإلكترونات، في أشباه الموصلات مثل السيليكون. ولكن حاول الفيزيائيون تسخير دوران الإلكترون بدلاً من شحنته لإنشاء جيل جديد من الأجهزة الإلكترونية الأصغر حجمًا، وأكثر تنوعًا وقوة من تلك التي تشكل الرقائق والدوائر الكهربائية اليوم [19]، التطورات الأخيرة في مجال تكنولوجيا المعلومات والاتصالات مما جعل لهذه الأجهزة الإلكترونية قدرة عالية في تخزين المعلومات وسرعة معالجة البيانات ونقلها. [20]

نتعامل مع الإلكترونيات الدورانية في حياتنا اليومية، على سبيل المثال الصمامات التي تدور على أساس تأثير المقاومة المغناطيسية العملاقة GMR، والتي تُستخدم في محركات الأقراص الصلبة المغناطيسية [19]. والتي تستخدم في الحساسات المغناطيسية ورؤوس قراءة الأقراص الصلبة HDD، كما تم اكتشاف تأثير المقاومة المغناطيسية النفقية (TMR) [21]، إلا أن تكنولوجيا المعلومات والاتصالات في المستقبل تتطلب معدل مرتفع من نقل البيانات من خلال الألياف البصرية. الكثير من هذا النقل السريع للبيانات يعود إلى الصمام الثنائي laser [22].

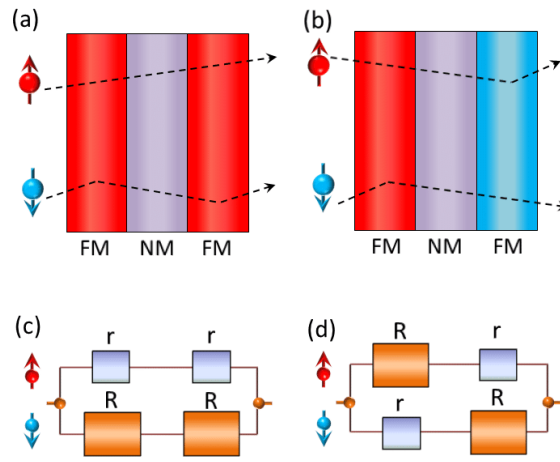
### 2.4.II. المقاومة المغناطيسية العملاقة GMR

هي اختصار للجملة "Giant Magnetoresistance" تم اكتشاف تأثير المغناطيسية العملاقة GMR في متعددة الطبقات المغناطيسية عام 1986 من قبل غرونبير (P. Grinberg) وفير [21]. (A. Fert) حيث يتكون صمام العزم المغزلي من طبقتين فيرومغناطيسيتين مثل الكوبالت أو الحديد يمكن

تغيير قطبيتها في وجود مجال مغناطيسي ضعيف وتفصل بينهما طبقة رقيقة جدا معدنية غير مغناطيسية مثل الكروم أو النحاس (الشكل 6.II).

ان تأثير GMR يجعل المقاومة الكهربائية للعينة يعتمد على اتجاه المغناطيسية في الطبقات المغناطيسية وتكون المقاومة أعلى في حالة أن يكون اتجاه المغناطيسية في الطبقات معاكسة، بعكس المقاومة عندما تكون مغناطيسية الطبقات في نفس الاتجاه، حيث ان سبائك Heusler هي أفضل المركبات لصنع صمامات الدوران بفضل استقطابها الدوراني بنسبة 100% على مستوى فيرمي ومستوى درجات حرارة

كوري عالية جدا. مثل: صمامات الدوران القائمة على  $\text{Co}_2\text{MnG}$  . [13]



الشكل 6.II: صمام العزم المغزلي Vannes de spin

### II 3.4. مقاومة مغناطيسية نفقية (TMR)

هي اختصار للجملة " Magnetoresistance a effet tunnel "، واكتشفتها جولير عام 1975 [23]، تركيبها يشبه تركيب المقاومة المغناطيسية العملاقة GMR حيث تم استبدال طبقة معدنية غير مغناطيسية بطبقة من مادة عازلة حيث عندما يصل سمك الطبقة الرقيقة عدة نانومترات فيمكن للإلكترونات الانتقال بين المغناطيسين. الية عملها بحيث عند تطبيق مجال مغناطيسي خارجي على العينة يمكن ضبط اتجاه المغناطيسية في أي من الطبقتين المغناطيسيتين بدون إلزام للطبقة الأخرى، عندما يكون اتجاه الطبقتين المغناطيسيتين مغطاة القطبين المغناطيسيين الحديديين متماثل، فإن احتمال انتقال الإلكترونات بين الطبقتين

عبر الطبقة العازلة يكون أكبر، مما ينتج عنه تيار أكبر، أما إذا كانت الطبقتين المغناطيسيتين متعاكستين في الاتجاه، فإن احتمال انتقال الإلكترونات بين الطبقتين عبر الطبقة العازلة يكون أقل، وبالتالي ينتج عنه تيار أقل. حيث نجدها في رؤوس القراءة التي تستخدم لقراءة المعلومات الموجودة على الأقراص الصلبة الحديثة، بالإضافة الى ظهور نوع جديد من الذاكرات MRAM يعمل بهذه التقنية [24].

## قائمة المراجع

- [1] J.Kübler, A.R.Williams and C.B.Sommers, Phys. 2, pp. 90-92, 1983.
- [2] A. Yanase and K. Siratori, "Band Structure in the High Temperature Phase of Rev, B28, pp. 1745–1755, 1983.
- [3] Z.Zhang and S.Satpathy, Electron states, magnetism, and the verwey transition in magnetite, Phys. Rev. B, vol. 44, no. 24, pp. 13319–13331, Dec. 1991.
- [4] Kadjoud Mohamed, "Étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés Heusler : Etude ab-initio", 2020.
- [5] Claudia Felser, Atsufumi Hirohata Editors, Heusler Alloys Properties, Growth , Applications, Springer Series in Materials Science Volume 222, 2016.
- [6] A. J. Bradley and J. W. Rodgers. The Crystal Structure of the Heusler Alloys. Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 144(852), pp. 340-359, March 1934.
- [7] R. A. de Groot and F.M.Mueller, " New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets," Phys. Rev. Lett., vol. 50, n°. 25, pp. 2024–2027, Jun. 1983.
- [8] T. Graf, C. Felser, S. S. P. Parkin, Progress in Solid State Chemistry 39, pp. 1-50, 2011.
- [9] Shinpei Fujii, Shoji Ishida, and Setsuro Asano. "A Half-Metallic Band Structure and Fe<sub>2</sub>MnZ (Z=Al,Si,P)". Journal of the Physical Society of Japan, 64(1), pp. 185–191, January 1995.
- [10] M. Puselj, Z. Ban, Croat Chem Acta 41, pp. 79, 1969.
- [11] Puselj, M. and Z. Ban, Ternare phases des types MIVMIB (11B) Hg<sub>2</sub>. Journal of the Less Common Metals, 42(3), pp. 279-283, 1975.
- [12] T. Graf, F. Casper, J. Winterlik, B. Balke, G.H. Fecher, C. Felser, Z.Anorg. Allg.Chem 635, pp. 976, 2009.
- [13] MOUSSALI Amel, Contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et thermodynamiques des alliages Heusler Ni<sub>2</sub>LaZ (Z=As, Sb et Bi): Méthode ab-initio, 2019.

- [14] FAID fares, "Contribution à l'étude des alliages Heusler à base de Vanadium par les méthodes de premier principe", 2018.
- [15] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. vanEngen, and K. H. J. Buschow, "New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets". Phys. Rev.Lett, 50(25), pp. 2024–2027, June1983.
- [16] J. M. D. Coey and M. Venkatesan, Journal of Applied Physics, vol. 91, n° 10(15), May 2002
- [17] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, Phys. Rev Lett. 50(2024), 1983.
- [18] J. Kübler, A.R. Williams, C.B. Sommers, Phys. Rev. B 28, 1745, 1983.
- [19] Goual Elouered, Etude ab-initio de la structure électronique et magnétique des Heuslers à base de manganèse, 2019.
- [20] H. Munekata, H. Ohno, S. von Molnar, A. Segmoller, L. L. u Chang and L. Esaki Phys. Rev.Lett. 63, pp. 1849, 1989.
- [21] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, Phys Rev Lett. 57, 1986.
- [22] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, Phys. Rev.Lett. 61, pp. 2472, 1988.
- [23] U. Schlickum, C. L. Gao, W. Wulfhekel, J. Henk, P. Bruno, and J. Kirschner, Phys. Rev.B **74**, 054409, 2006.
- [24] HANIFE Tuzcuoglu, Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co<sub>2</sub>FeAl, 2014.

## الفصل الثالث النتائج والمناقشة

### 1.III. مقدمة

في هذا الفصل سوف نتطرق الى مناقشة الحسابات والنتائج للمركبات  $\text{NaMnZ}_2$  و  $\text{NaVZ}_2$  حيث  $(Z = O, S)$  التي تشمل دراسة الخصائص البنيوية، الالكترونية، المغناطيسية، وذلك باستخدام طريقة الأمواج المستوية الخطية (FP-LAPW) المدمجة في برنامج Wien2K في اطار نظرية دالة الكثافة [2,1] DFT. ولحساب كمون التبادل والارتباط استخدمنا تقريب التدرج المعمم (GGA) [3].

### 2.III. تفاصيل الحساب

تم دراسة الخصائص البنيوية، الالكترونية، المغناطيسية، والمرونية للمركبات الاربعة  $\text{NaVZ}_2$  و  $\text{NaMnZ}_2$  حيث  $(Z = O, S)$  التي تنتمي لعائلة هوسلر الكاملة Full-Heusler في الحالة المغناطيسية واللامغناطيسية. حيث تم حساب (ثابت الشبكة  $a(A^\circ)$ ، طاقة التماسك، طاقة التشكل، بنية أحزمة الطاقة، كثافة الحالة الكلية والجزئية) مع اختيار وتهيئة عدد النقاط  $K\text{points}=3000$  في المنطقة الاولى لبريلوان لكل المركبات. لتحديد الخصائص السابقة تعطى حالة تكافؤ لكل ذرة وبيانات برنامج Wien2K، حيث RMT: نصف قطر الكرة،  $G_{\text{max}}$ : شعاع الشبكة العكسية، الجدول 1.III. يوضح ذلك.

الجدول 1.III: بيانات برنامج Wien2K لكل مركب.

Gmax	RMT*Kmax	RMT(u.a)	حالة التكافؤ	المركب
14	9	Na=2	Na [Ne] 3s <sup>1</sup>	NaVZ <sub>2</sub>
		V=2	V [Ar] 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	
		Z=O	Z=O [He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	
		Z=S	Z=S [Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	
14	9	Na=2	Na [Ne] 3s <sup>1</sup>	NaMnZ <sub>2</sub>
		Mn=2	Mn [Ar] 4s <sup>2</sup> 3d <sup>5</sup>	
		Z=O	Z=O [He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	
		Z=S	Z=S [Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	

### 3.III. الخصائص البنيوية

في حساب المبدأ الأول (ab-initio)، تتمثل الخطوة الجد مهمة في تحديد الخصائص البنيوية لنظام معين في حالته الأساسية، والتي من خلالها يمكن تحديد الخصائص الفيزيائية الأخرى.

#### 1.3.III. البنية البلورية لسبائك كامل هوسلر Full-Heusler

تتنمي المركبات  $\text{NaVZ}_2$  و  $\text{NaMnZ}_2$  حيث  $(Z = \text{O}, \text{S})$  لعائلة هوسلر الكاملة Full-Heusler التي تتبلور في هيكلين: هيكل أول مكعب عادي من النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  كنموذج أولي (المجموعة الفضائية  $Fm\bar{3}m$  n° 225)، وهيكل ثاني مكعب عكسي من النوع  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  (المجموعة الفضائية n°216  $F\bar{4}3m$ )، الجدول 2.III. [4]

الجدول 2.III: تموضع الذرات لكل مركب في كل من الهيكلين  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  و  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ .

المركب	البنية	4a	4b	4c	4d
$\text{NaVZ}_2 (Z = \text{O}, \text{S})$	$\text{Hg}_2\text{CuTi}$	$Z_1$	V	$Z_2$	Na
$\text{Cu}_2\text{MnAl}$		V	Na	Z	Z
$\text{NaMnZ}_2 (Z = \text{O}, \text{S})$	$\text{Hg}_2\text{CuTi}$	$Z_1$	Mn	$Z_2$	Na
$\text{Cu}_2\text{MnAl}$		Mn	Na	Z	Z

#### 2.3.III. دراسة استقرار المركبات في حالة المغناطيسية الحديدية واللامغناطيسية (NM/FM)

لتحديد الخواص البنيوية بالقرب من التوازن لنظام معين يتميز بقيمة مختلفة لثوابت الشبكة، لحسابات

الطاقة الكلية كتابع لحجم الخلية الأساسية نطبق معادلة الحالة لمرنفهان والتي تعطى بالعلاقة التالية:

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

حيث  $E_0, V_0, B, B'$  على الترتيب: الطاقة الكلية، حجم التوازن، معامل الانضغاط، المشتقة الأولى لمعامل الانضغاط.

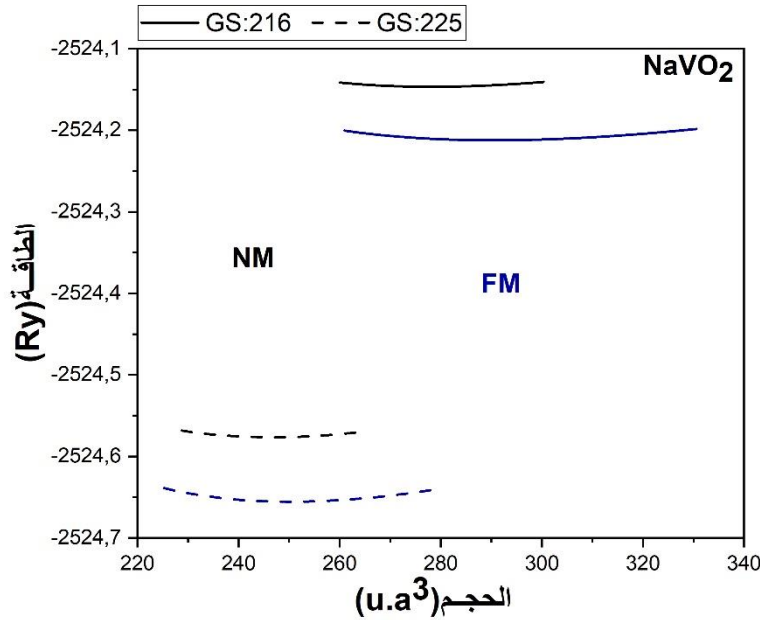
يعطى معامل الانضغاط بالعلاقة التالية:

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

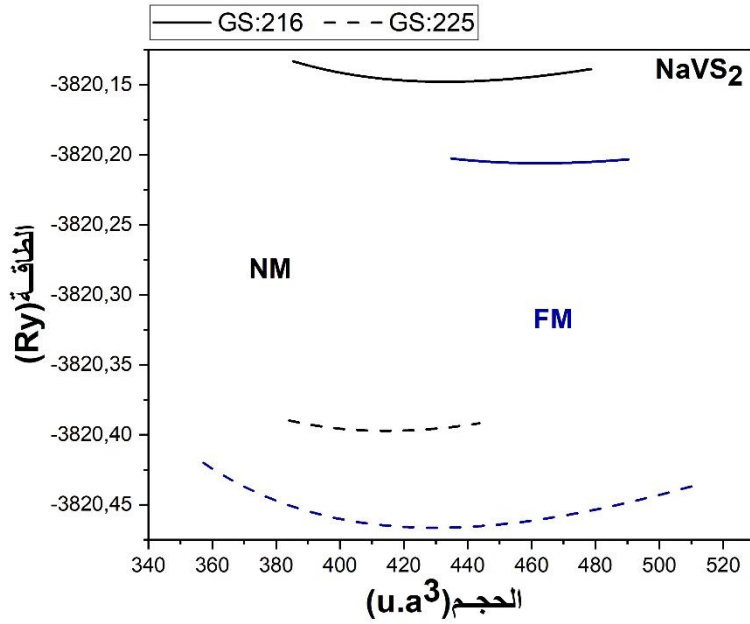
تعطى المشتقة الأولى لمعامل الانضغاط بالعلاقة التالية:

$$V = V_0 \left( 1 + \frac{B'P}{B} \right)^{-1/B'} \quad (3.III)$$

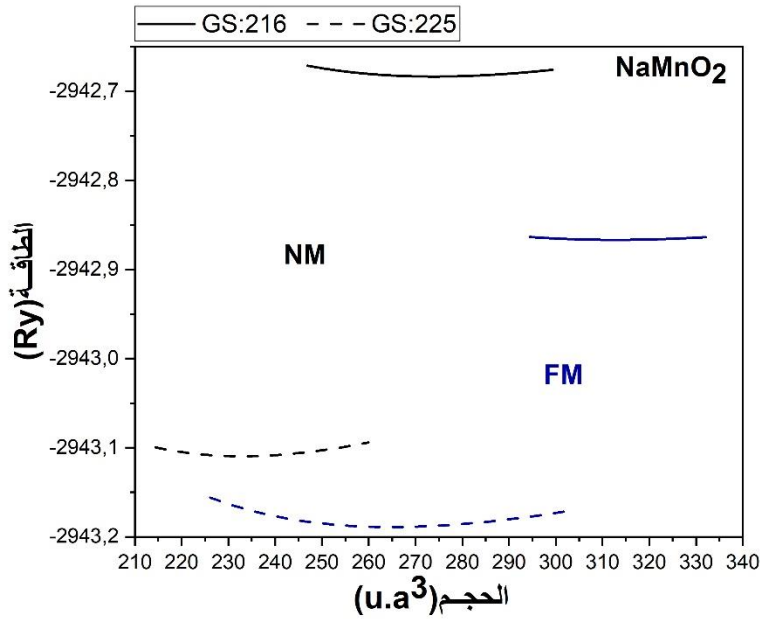
تم حساب الطاقة الكلية بدلالة الحجم للمركبات  $\text{NaMnZ}_2$  و  $\text{NaVZ}_2$  حيث  $(Z = O, S)$  في الحالة المغناطيسية الحديدية واللامغناطيسية في كل من الهيكلين  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  و  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  بإستعمال تقريب التدرج المعمم GGA في مخطط PBE (Perdew-Burke-Ernzerh)، (أنظر الاشكال 1.III و 2، 3، 4).



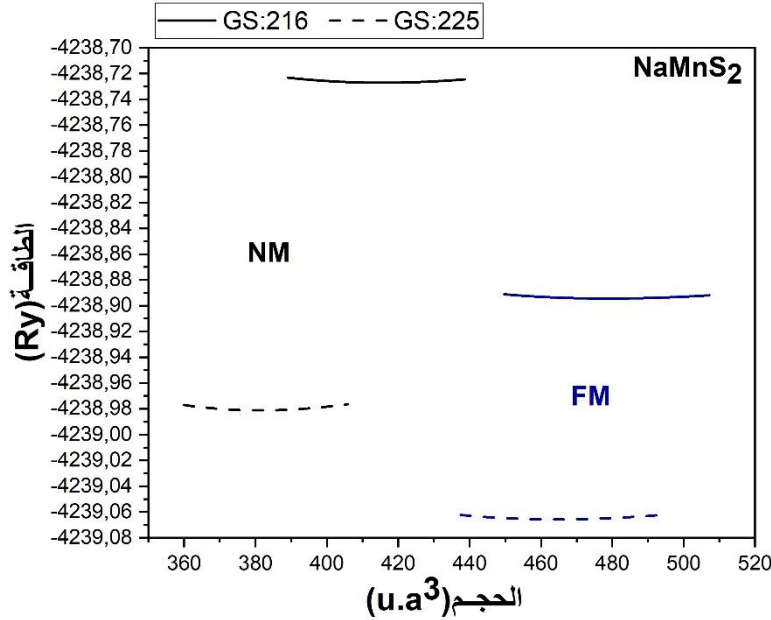
الشكل 1.III: تغيرات الطاقة الكلية للمركب  $\text{NaVO}_2$  في كلا الهيكلين  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  و  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  في الحالة (NF/FM).



الشكل 2.III: تغيرات الطاقة الكلية للمركب NaVS<sub>2</sub> في كلا الهيكلين Cu<sub>2</sub>MnAl و Hg<sub>2</sub>CuTi في الحالة (NF/FM)



الشكل 3.III: تغيرات الطاقة الكلية للمركب NaMnO<sub>2</sub> في كلا الهيكلين Cu<sub>2</sub>MnAl و Hg<sub>2</sub>CuTi في الحالة (NF/FM)



الشكل 4.III: تغيرات الطاقة الكلية للمركب  $\text{NaMnS}_2$  في كلا الهيكلين  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  و  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  في الحالة (NF/FM)

نلاحظ من خلال الأشكال (1.III، 2، 3، 4) أن السبائك الأربعة أكثر استقراراً في الهيكل من النوع

$\text{Cu}_2\text{MnAl}$  في الحالة المغناطيسية الحديدية والذي يوافق أدنى طاقة.

الجدول التالي يوضح الخصائص البنيوية والهيكلية ثابت الشبكة البلورية  $a(\text{Å})$ ، معامل الانضغاطية

$B(\text{GPa})$  والمشتقة الأولى للمعامل الانضغاطية وهذا باستخدام معادلة الحالة لمرنقهان، ثم مقارنة النتائج

المتحصل عليها مع النتائج النظرية لدراسة سابقة بالنسبة للمركبين  $\text{NaVO}_2$  و  $\text{NaMnO}_2$  [4]، أما بالنسبة

للمركبين  $\text{NaVS}_2$  و  $\text{NaMnS}_2$  فلا توجد دراسة سابقة للمقارنة، النتائج مدونة في الجدول 3.III:

الجدول 3.III: ثابت الشبكة البلورية  $a(A^\circ)$ ، معامل الانضغاطية  $B(GPa)$  والمشتقة الأولى للمعامل الانضغاطية  $B'$  لكل مركبات في كل من الهيكليين  $Hg_2CuTi$  و  $Cu_2MnAl$ .

NM			FM [4]			FM			البنية	المركب
$B'$	$B$ (GPa)	$a(A^\circ)$	$B'$	$B$ (GPa)	$a(A^\circ)$	$B'$	$B$ (GPa)	$a(A^\circ)$		
4.38	113.59	5.48	5.18	93.22	5.56	4.77	94.01	5.56	$Hg_2CuTi$ $NaVO_2$	
3.94	168.71	5.26	4.46	160.7	5.29	4.61	163.3	5.29	$Cu_2MnAl$	
4.40	111.54	5.45	4.78	80.94	5.65	3.38	82.58	5.70	$Hg_2CuTi$ $NaMnO_2$	
4.44	175.05	5.16	4.59	122.1	5.40	5.31	123.2	5.39	$Cu_2MnAl$	
4.52	66.35	6.35	-	-	-	4.14	53.52	6.49	$Hg_2CuTi$ $NaVS_2$	
4.30	86.02	6.26	-	-	-	4.48	78.60	6.33	$Cu_2MnAl$	
2.92	63.29	6.26	-	-	-	4.92	49.00	6.57	$Hg_2CuTi$ $NaMnS_2$	
4.09	94.07	6.08	-	-	-	3.54	61.23	6.50	$Cu_2MnAl$	

نلاحظ من خلال الجدول أن القيم النظرية التي قمنا بحسابها متوافقة مع القيم الموجودة في الدراسات

السابقة [4]، بما أن السبائك الأربعة أكثر استقرارا في المكعب العادي من النوع  $Cu_2MnAl$  في الحالة المغناطيسية الحديدية، فإننا نختصر الدراسة القادمة في هذا الهيكل فقط.

### 3.3.III. طاقة التماسك $E_{coh}$ والتكوين (التشكُّل) $E_{for}$

في هذا الجزء نختصر حساب طاقة التماسك والتشكل للمركبات  $NaVZ_2$  و  $NaMnZ_2$  حيث  $(Z = O, S)$

في هيكل  $Cu_2MnAl$  لأنه أكثر استقرارا النتائج النظرية ودراسة سابقة موضحة في الجدول 4.III.

#### 1.3.3.III. طاقة التماسك $E_{coh}$

من اجل دراسة الاستقرار الفيزيائي للمركبات نقوم بحساب طاقة تماسك لها  $E_{coh}$ ، والتي تُعرَّف بأنها

الفرق بين الطاقة الكلية للمركب ومجموع الطاقات الكلية للذرات المعزولة المكونة للمركب، تعكس طاقة التماسك

القوة التي ترتبط بها الذرات مع بعضها البعض في الحالة الصلبة [5]. يتم حسابه من العلاقة التالية:

$$E_{coh}(NaVZ_2) = E_{tot}^{NaVZ_2_{bulk}} - [E_{tot}(Na) + E_{tot}(V) + 2E_{tot}(Z)] \quad (4.III)$$

$$E_{coh}(NaMnZ_2) = E_{tot}^{NaMnZ_2_{bulk}} - [E_{tot}(Na) + E_{tot}(Mn) + 2E_{tot}(Z)] \quad (5.III)$$

### 2.3.3.III. طاقة التكوين (التشكّل)

من أجل دراسة الاستقرار الكيميائي وإمكانية تحضير المركبات تجريبياً، والتي تُعرّف بأنها الفرق بين الطاقة الكلية للبلورة ومجموع طاقات العناصر المكونة لهذه البلورة في حالتها النقية والتي يمكن حسابها بالعلاقة التالية:

$$E_f(\text{NaVZ}_2) = E_{tot}^{\text{NaVZ}_2\text{-bulk}} - [E_{tot}^{\text{Na,bulk}} + E_{tot}^{\text{V,bulk}} + 2E_{tot}^{\text{Z,bulk}}] \quad (6.III)$$

$$E_f(\text{NaMnZ}_2) = E_{tot}^{\text{NaMnZ}_2\text{-bulk}} - [E_{tot}^{\text{Na,bulk}} + E_{tot}^{\text{Mn,bulk}} + 2E_{tot}^{\text{Z,bulk}}] \quad (7.III)$$

الجدول 4.III. طاقة التماسك والتكوين (التشكّل) للمركبات الأربعة  $\text{NaVZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) و  $\text{NaMnZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ).

الطاقة	القيم	$\text{NaVO}_2$	$\text{NaVS}_2$	$\text{NaMnO}_2$	$\text{NaMnS}_2$
$E_{tot}(\text{Ry})$	النظرية	-2524,6446	-3820,4667	-2943,1769	-4239,0638
$E_f(\text{Ry})$	النظرية	-0,38	-0,24	-0,27	-0,19
	[4]	-0,78	-	-0,66	-
$E_{coh}(\text{Ry})$	النظرية	-1,5638	-1,2992	-1,1156	-0,9158
	[4]	-1,32	-	-1,07	-

من خلال الجدول 4.III. نلاحظ أن قيم طاقة التماسك والتشكّل سالبة للمركبات التي قمنا بدراستها

وبالتالي يمكن تحضيرها تجريبياً. هذه القيم تحفز التجريبيين على تحضير هذه المركبات مستقبلاً.

### 4.III. الخصائص الإلكترونية

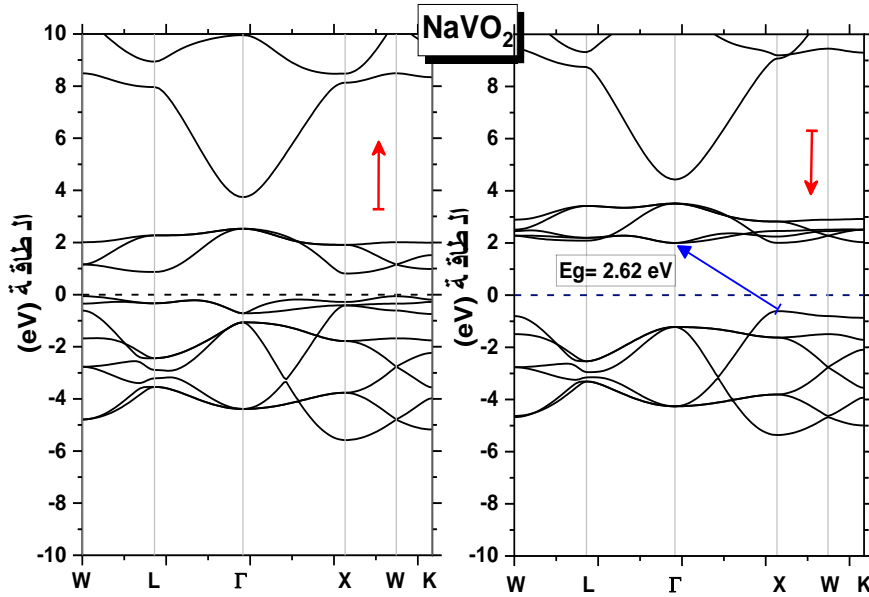
في هذا الجزء نقوم بدراسة ومناقشة أحزمة الطاقة وكثافة الحالات الكلية للمركبات  $\text{NaVZ}_2$

$\text{NaMnZ}_2$  حيث ( $Z = \text{O, S}$ ) في المكعب العادي من النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  في حالة المغناطيسية الحديدية

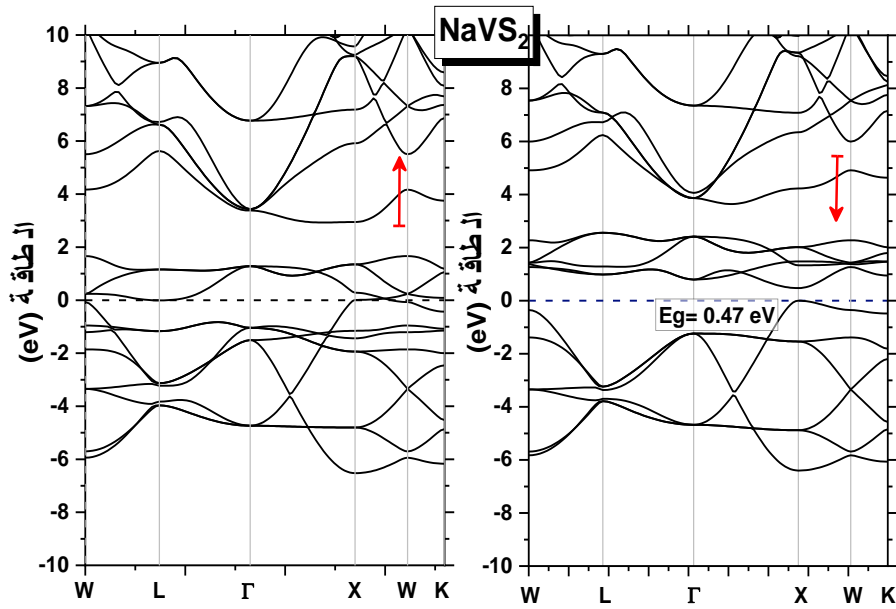
(FM) مع تحديد الطبيعة الإلكترونية لها.

### 1.4.III. أحزمة الطاقة

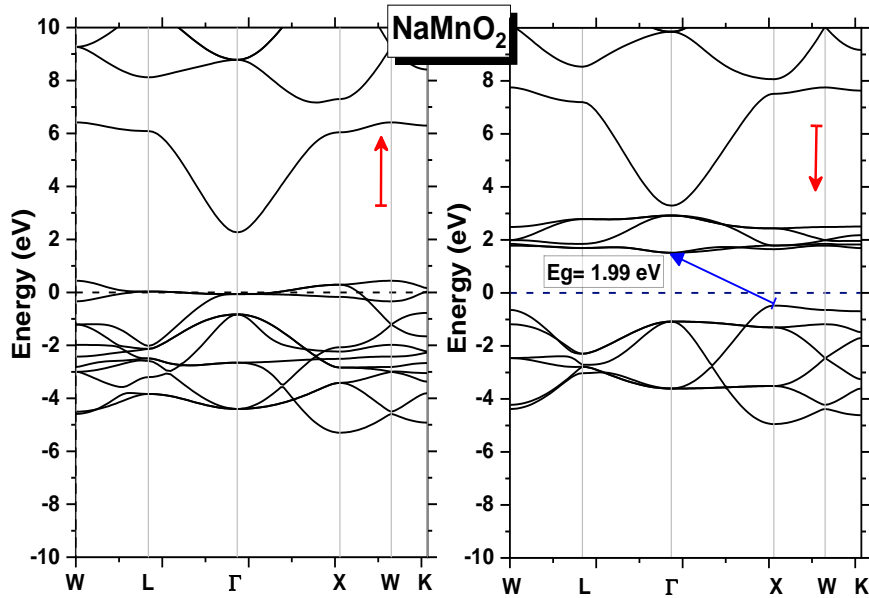
نقوم بدراسة تغيرات الطاقة للإلكترون بدلالة الشعاع الموجي  $K$ ، في منطقة بريليون الأولى في الفضاء المعكوس، متضمنة نقاط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA لتحديد طبيعة المركبات إن كان موصلًا، عازلاً، نصف ناقل..... الخ من خلال الدراسة والملاحظات نجد أن الخصائص العامة لأحزمة الطاقة للمركبات الأربعة متشابهة نوعياً بسبب تشابه تركيبها البلوري وبيئتها الكيميائية، بينما توجد بعض الاختلافات في تفاصيل البنية، الأشكال (5.III، 6، 7، 8) توضح أحزمة نطاق الغزل العلوي (spin up  $\uparrow$ ) والسفلي (spin dn  $\downarrow$ )



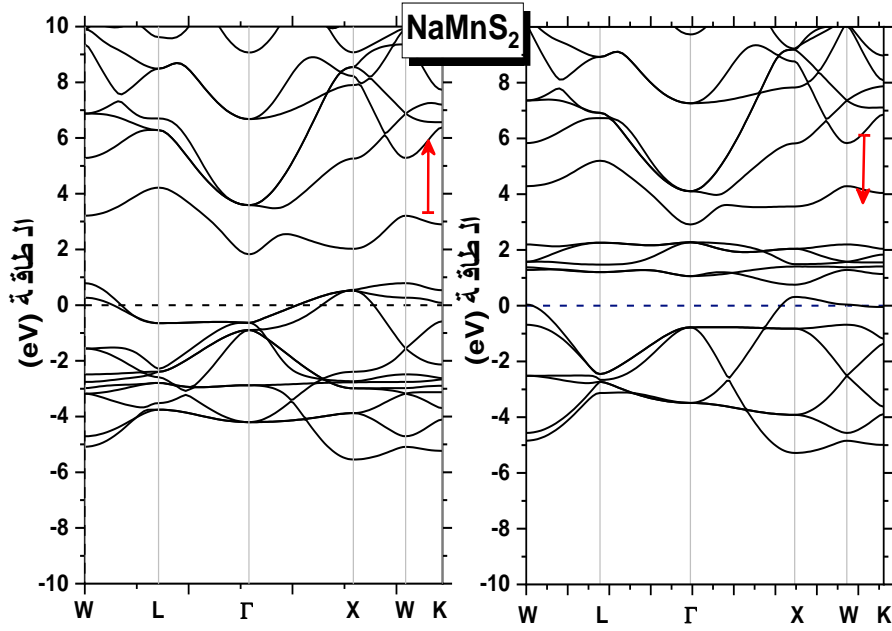
الشكل 5.III: أحزمة الطاقة للمركب  $\text{NaVO}_2$  وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.



الشكل 6.III: أحزمة الطاقة للمركب  $\text{NaVS}_2$  وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.



الشكل 7.III: أحزمة الطاقة للمركب  $\text{NaMnO}_2$  وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.



الشكل 8.III: أحمزة الطاقة للمركب  $\text{NaMnS}_2$  وفق خطوط التناظر العالية وباستعمال التقريب GGA.

تداخل في أحمزة النطاق الغزل العلوي ( $\text{spin up} \uparrow$ ) عند مستوى فيرمي بين أحمزة التكافؤ والتوصيل للمركبات الأربعة مما يدل على انها تحمل خاصية معدن. كما بينت أحمزة الطاقة الغزل السفلي ( $\text{spin dn} \downarrow$ ) عن وجود فجوة نطاق (gap) غير مباشرة عند مستوى فيرمي قيمتها  $E_g=2,62\text{eV}$  ،  $E_g=1,99\text{eV}$ ، للمركبين  $\text{NaMnO}_2$  و  $\text{NaVO}_2$  على الترتيب، وفجوة نطاق (gap) مباشرة عند مستوى فيرمي قيمتها  $E_g=0,47\text{eV}$  للمركب  $\text{NaVS}_2$ ، وبالتالي فإنها تحمل خاصية شبه موصل، هذه الفجوات تؤدي إلى استقطاب دوران بنسبة 100% على مستوى فيرمي [6]، ومنه يمكن القول أن هذه السبائك تحمل خاصية نصف معادن مغناطيسية حديدية *demi-métalliques* وهي خاصية مهمّة جدا في سبائك هوسلر، أما المركب  $\text{NaMnS}_2$  فلا يحتوي على فجوة نطاق (gap) وبالتالي يمكن القول أن هذا المركب يحمل خاصية معدن.

## III.2.4. كثافة الحالة DOS

من أجل معرفة أصل بنية أحزمة الطاقة الإلكترونية، قمنا بحساب كثافة الحالات الكلية (TDOS)

(Total density of states) والجزئية (PDOS: Partial density of states) للمركبات  $\text{NaVO}_2$  و  $\text{NaVS}_2$ ،

$\text{NaMnO}_2$ ،  $\text{NaMnS}_2$  باستعمال تقريب GGA، (انظر الشكلين III.5 و III.6).

من أجل إثبات وجود مانع طاقي نحسب الكثافة الكلية في مستوى فيرمي ( $E_f$ ) حيث تعرف علاقة استقطاب

الإلكترونات (P) [7].

$$p = \frac{\rho \uparrow(E_f) - \rho \downarrow(E_f)}{\rho \uparrow(E_f) + \rho \downarrow(E_f)} \quad (5.III)$$

$\rho \uparrow (E_f)$  : مقدار كثافة الحالات عند مستوى فيرمي في حالة الغزل أعلى.

$\rho \downarrow (E_f)$  : مقدار كثافة الحالات عند مستوى فيرمي في حالة الغزل أسفل.

في حالة مركباتنا فهي نصف معادن لأن قيمة الاستقطاب  $P = 1$  وهي مرتبطة بكثافة الحالات الإلكترونية

.DOS

اهتمينا بالمستوى الطاقوي انطلاقاً من:  $-6\text{eV}$  و  $0\text{eV}$  (مستوى فيرمي)، لأن المستويات الطاقوية الأقل

هي أكثر استقراراً ولا تساهم في التفاعلات الإلكترونية.

المركب  $\text{NaVZ}_2$ :

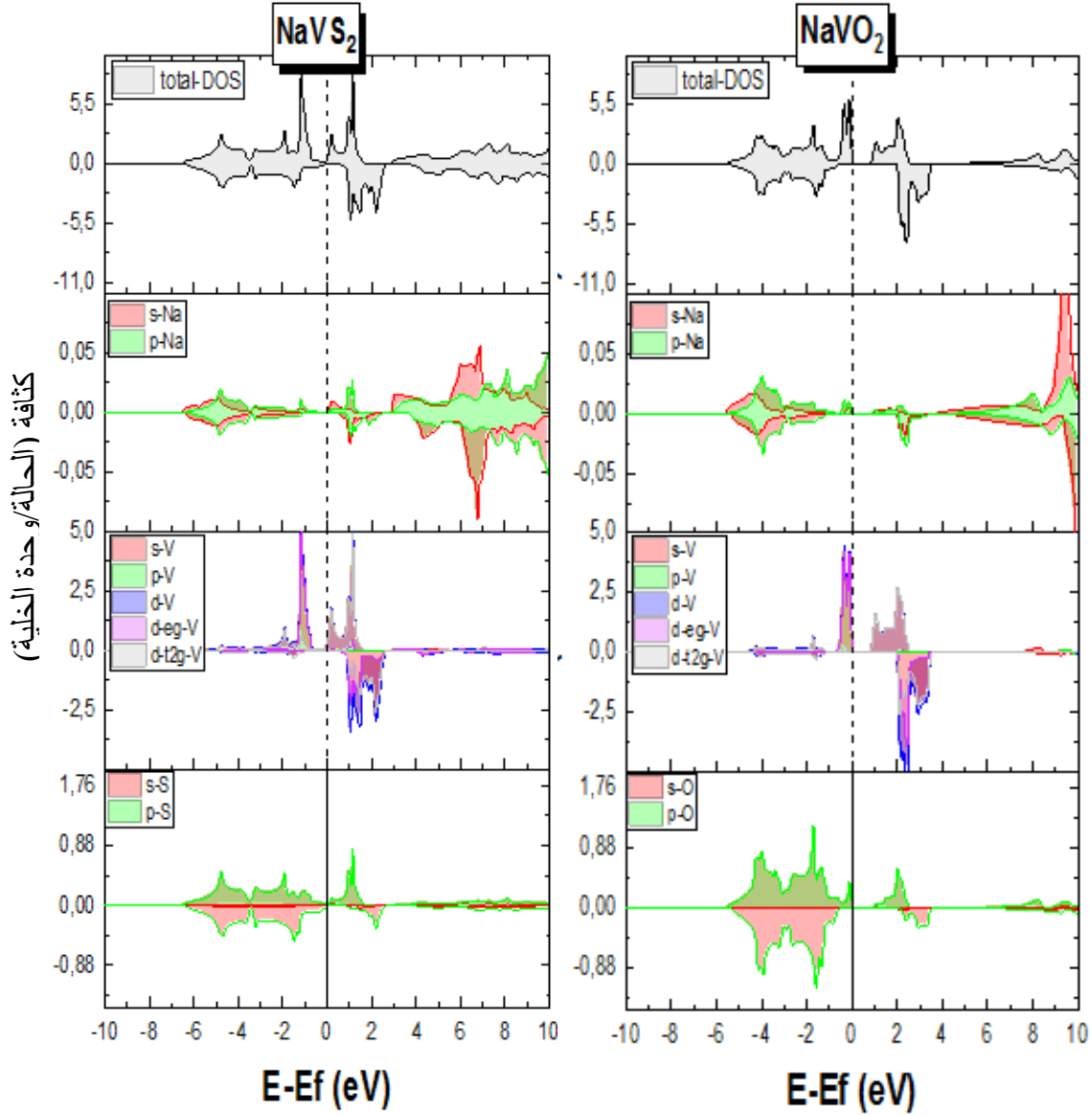
وفقاً للكثافة الجزئية للحالات PDOS، فإن المساهم الرئيسي هو المدارات (d) للعنصر V، والمدار (P)

للعنصر Z في الكثافة الكلية للحالة و أنّ مغنطة المركب  $\text{NaVZ}_2$  ناتجة عن المساهمة الكبيرة لذرات V. أما

صفة الناقلية المعدنية فهي ناتجة عن المساهمة التشاركية الكبيرة لمدارات (3d) لذرات V هذه الخاصية وكذا

خاصية المغنطة، لأنها تساهم بشكل واضح مع ذرات V وبالتهجين مع مدارات (p) لذرة Z، (انظر الشكل

III.9 و III.10).

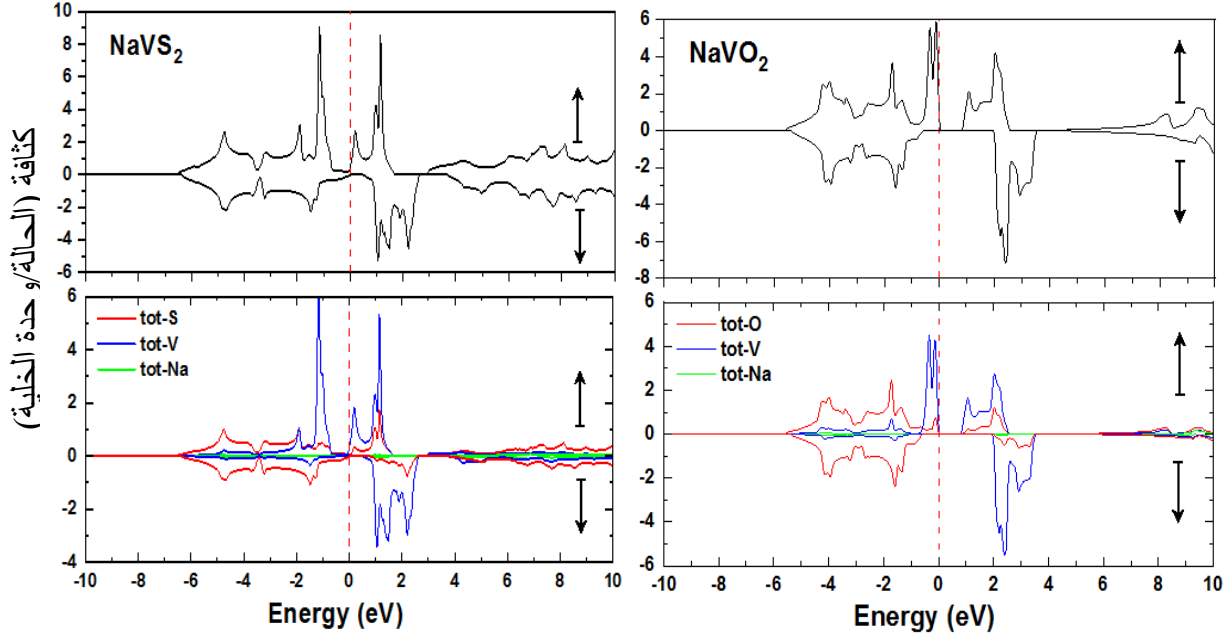


الشكل 9.III: كثافة الحالة TDOS للمدارات للمركب  $\text{NaVZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) والجزئية PDOS.

من خلال الشكل III. 9 و 10 نلاحظ:

- ✓ من المجال -6eV الى -4eV: مساهمة كبيرة للمدارات (S-P) للعنصر Z.
- ✓ ما من المجال -4eV الى -2eV فتعود فقط لمساهمة للمدار (P) للعنصر Z.
- ✓ من المجال -2eV الى 0eV مستوى فيرمي فتعود للمساهمة الكبيرة للمدار (d-eg) للعنصر V.

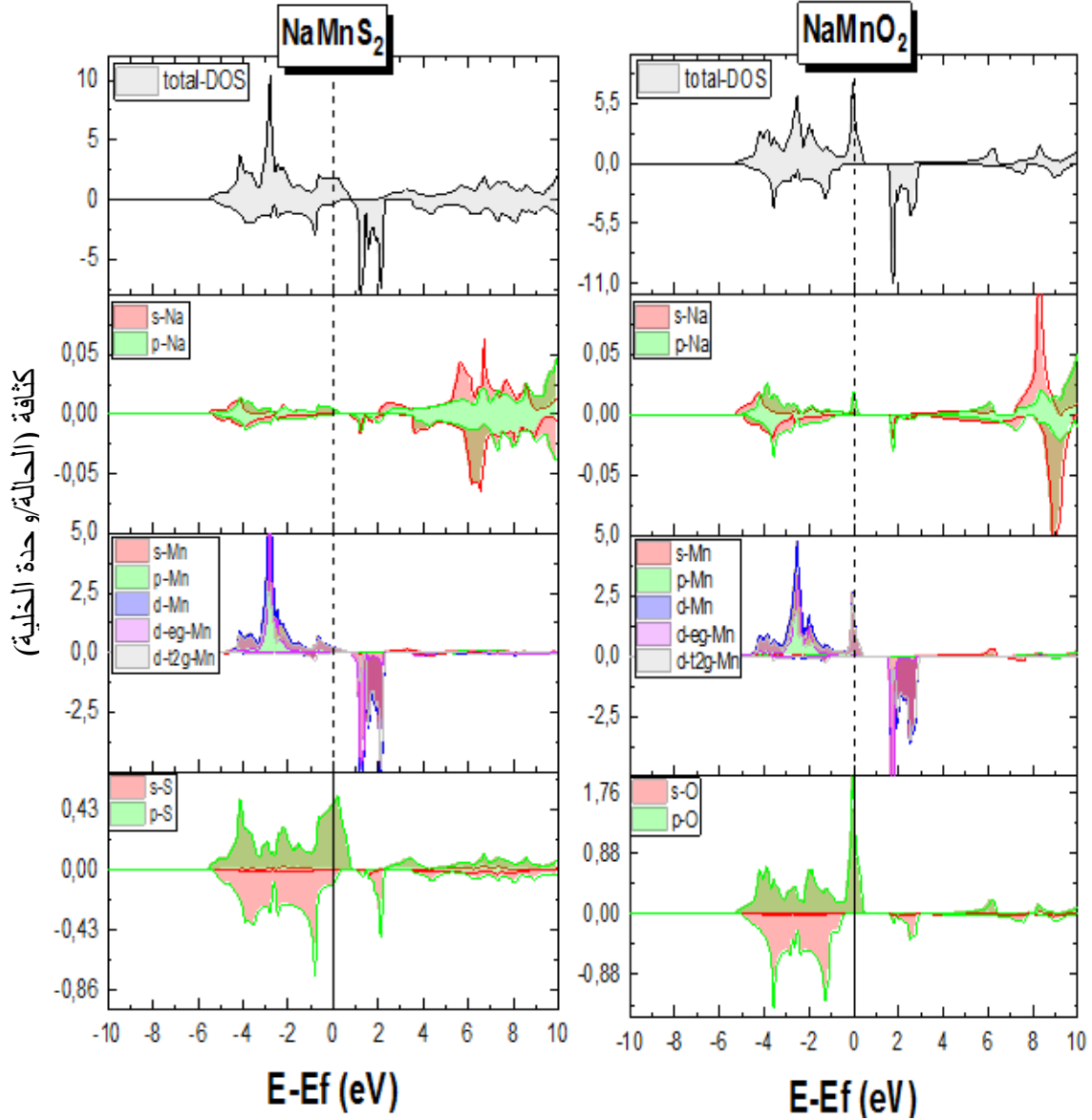
✓ من المجال 0eV الى 4eV تعود الى المساهمة الكبيرة (d-eg) للعنصر V مع المساهمة الضئيلة للمدارات (S-P) للعنصر Z في الكثافة الكلية للحالة لكلا المركبين.



الشكل 10.III: كثافة الحالة TDOS للمركب  $\text{NaVZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) والجزئية PDOS المحسوبة بواسطة GGA.

### المركب $\text{NaMnZ}_2$ :

وفقاً للكثافة الجزئية للحالات PDOS، فإن المساهم الرئيسي هو المدارات (d) للعنصر Mn، والمدار (P) للعنصر Z في الكثافة الكلية للحالة وأن مغنطة المركب  $\text{NaMnZ}_2$  ناتجة عن المساهمة الكبيرة لذرات Mn. أما صفة الناقلية المعدنية فهي ناتجة عن المساهمة التشاركية الكبيرة لمدارات (3d) لذرات Mn هذه الخاصة وكذا خاصية المغنطة، لأنها تساهم بشكل واضح مع ذرات Mn وبالتهجين مع مدارات (p) لذرة Z، (انظر الشكل III. 11 و 12).



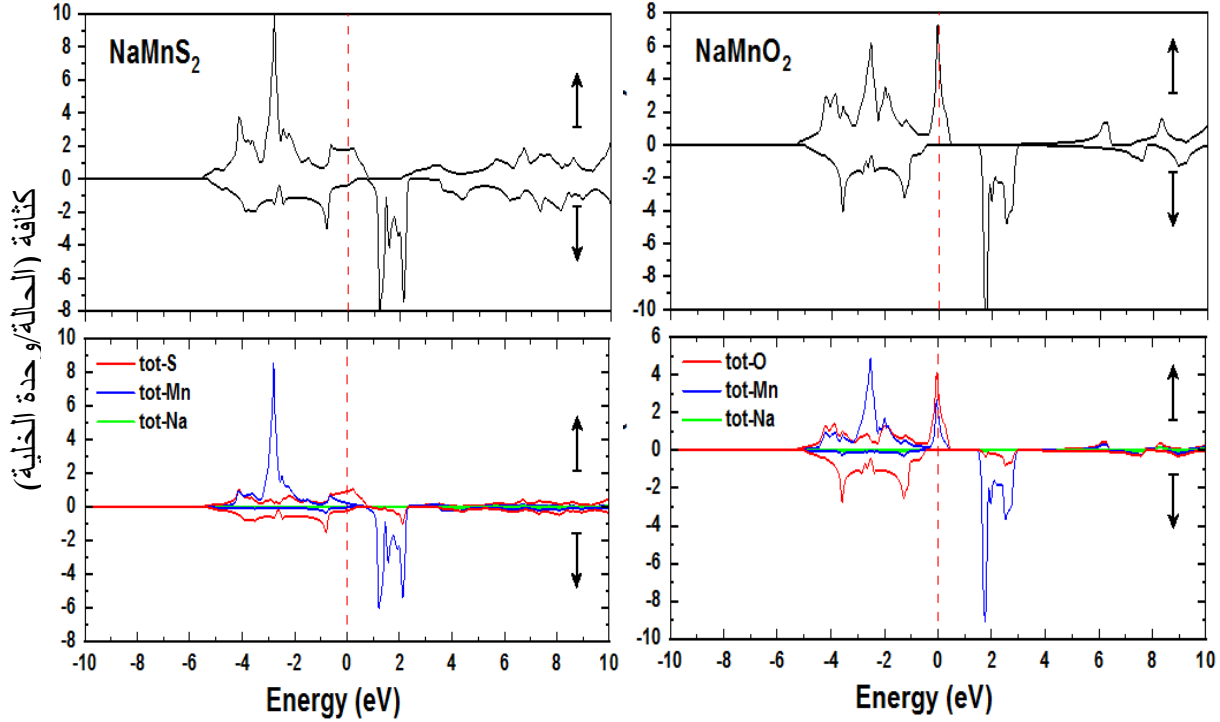
الشكل 11.III: كثافة الحالة TDOS للمدارات للمركب  $\text{NaMnZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) والجزئية PDOS.

من خلال الشكل 11.III و 12 نلاحظ:

- ✓ من المجال  $-6\text{eV}$  الى  $-4\text{eV}$ : مساهمة كبيرة للمدارات (S-P) للعنصر Z.
- ✓ من المجال  $-4\text{eV}$  الى  $-2\text{eV}$  فتعود فقط لمساهمة للمدار (d) للعنصر Mn.
- ✓ المجال  $-2\text{eV}$  الى  $0\text{eV}$  مستوى فيرمي فتعود فقط لمساهمة للمدارات (S-P) للعنصر Z.

✓ المجال 0eV الى 4eV تعود فقط الى مساهمة المدار (d-eg) للعنصر Mn في الكثافة الكلية للحالة

لكلا المركبين.



الشكل 12.III: كثافة الحالة TDOS للمركب  $\text{NaMnZ}_2$  ( $Z = \text{O}, \text{S}$ ) والجزئية PDOS المحسوبة بواسطة GGA.

### 5.III. الخصائص المغناطيسية

#### 1.5.III. العزم المغناطيسي

تم حساب العزم المغناطيسي الكلي  $M_{\text{tot}}$  للمركبات  $\text{NaMnS}_2$ ،  $\text{NaMnO}_2$ ،  $\text{NaVS}_2$  و  $\text{NaVO}_2$

والعزم المغناطيسي الجزيئي لكل ذرة (Mn, S, O, V, Na) باستخدام تقريب GGA. الجدول III.9. يوضح

ذلك.

جدول III. 9: قيم العزم المغناطيسي الكلي للمركبات الاربعة والجزئي لكل ذرة منه باستخدام تقريب GGA.

المركب	$M_{Na}$	$M_V$	$M_{Mn}$	$M_{Z1}$	$M_{Z2}$	$M_{int}$	$M_{tot}$
NaVS <sub>2</sub>	0.002	1.86	-	-0.1	-0.1	0.32	1.99
NaMnS <sub>2</sub>	0.004	-	3.99	-0.1	-0.1	0.30	4.10
NaVO <sub>2</sub>	0.01	1.79	-	-0.07	-0.07	0.34	2.00
NaMnO <sub>2</sub>	0.009	-	3.82	-0.09	-0.09	0.35	4.00
دراسة سابقة [4]							
NaVO <sub>2</sub>	0.01	1.79	-	-0.07	-0.07	0.34	2.00
NaMnO <sub>2</sub>	0.009	-	3.82	-0.09	-0.09	0.35	4.00

تساهم ذرات V بشكل كبير في العزم المغناطيسي الكلي بينما قيم العزم المغناطيسي لذرات Na و O،

S ضئيل في كل من المركبين NaVO<sub>2</sub> و NaVS<sub>2</sub>،

تساهم ذرات Mn بشكل كبير في العزم المغناطيسي الكلي بينما قيم العزم المغناطيسي لذرات Na و O،

S ضئيل في كل من المركبين NaMnO<sub>2</sub> و NaMnS<sub>2</sub>.

قاعدة سلاتر - بولينج Slater-Pauling:

$$M_t = (N_{up} - N_{dn}) \mu_B = (Z_t - 2N_{dn}) \mu_B \quad (8.III)$$

$$M_t = (Z_t - 12) \mu_B \quad (9.III)$$

$M_t$ : العزم المغناطيسي الكلي للمركب.

$N_{dn}$  و  $N_{up}$ : عدد حالات السبين الاغلبية والاقلية.

$Z_t$ : مجموع الكثرونات التكافؤ للمركب.

تحتوي سبائك هوسلر الكاملة Full-Heusler التي قمنا بدراستها على 14 و 16 الكثرون في طبقة

التكافؤ لكل وحدة خلية للمركبات NaVZ<sub>2</sub> (Z = O, S) و NaMnZ<sub>2</sub> (Z = O, S) على الترتيب حيث:

$Z_t=14$  (الكثرون واحد لذرة الصوديوم Na، 5 الكثرونات لذرة V، 4 الكثرونات لذرة  $2 \times Z$ )،  $Z_t=16$

(الكثرون واحد لذرة Na، 7 الكثرونات لذرة Mn، 4 الكثرونات لذرة  $2 \times Z$ )،  $N_{dn}=6$  هو عدد حالات سبين

الاقلية لأنه توجد فجوة نطاق (gap) عند مستوى فيرمي ( $E_f$ ) كما بينت أحزمة الطاقة الغزل السفلي

(↓ spin dn) (الاشكال 5.III و6، 7، 8)، مما ينتج عنه عزم مغناطيسي صحيح لكل وحدة خلية قيمته:  
 $M_t=4$ ،  $M_t=2$  للمركبات  $\text{NaMnZ}_2 (Z = \text{O}, \text{S})$  و  $\text{NaVZ}_2 (Z = \text{O}, \text{S})$  على الترتيب، ومنه يمكن القول  
أن هذه المركبات عبارة عن مواد نصف معدنية وهي خاضعة لقاعدة سلاتر - بولينج Slater-Pauling  
الموضحة في ( المعادلة 6.III).

## قائمة المراجع

- [1] S. Berri, D. Maouche, M. Ibrir, et F. Zerarga, « A first-principle study of half-metallic ferrimagnetism in the CoFeTiSb quaternary Heusler compound », *Magn. Mater.*, vol. 354, p. 65-69, 2014.
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, et S. B. Trickey, « Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems », *Comput. Phys. Commun.*, vol. 59, no 2, p. 399-415, 1990.
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, et M. Ernzerhof, « Generalized gradient approximation made simple », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no 18, p. 3865, 1996.
- [4] Kh Rajabi, F. Ahmadiian, Half-metallicity in new Heusler alloys NaTO<sub>2</sub> (T¼Sc, Ti, V, Cr, and Mn): A first-principles study, *Solid State Communication* 271, p. 29–38, 2018.
- [5] A. Ahmed, « Calcul ab-initio des Propriétés Physiques des Matériaux Demi-Métalliques. », PhD Thesis, Université Mohamed Boudiaf des sciences et de la technologi, 2016.
- [6] M. Bennett, K. Macdonald, S.-W. Chan, J. P. Luzio, R. Simari, et P. Weissberg, « Cell surface trafficking of Fas: a rapid mechanism of p53-mediated apoptosis », *Science*, vol. 282, no 5387, p. 290-293, 1998.
- [7] R.J . Soulen Jr. et al.,*Science* 282 (85), 1998.

خاتمة عامة

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية للمركبات هوسلر الكاملة Full-Heusler  $\text{NaMnZ}_2$  و  $\text{NaVZ}_2$  حيث  $(Z = O, S)$  الذي يتبلور في بنية مكعب عادي من النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  متماسكة ومستقرة، حيث استخدمنا في دراستنا طريقة الأمواج المستوية (FP-LAPW) المدمجة في برنامج Wien2K في اطار نظرية دالة الكثافة DFT حيث أنه لحساب كمون تبادل إرتباط استخدمنا تقريب التدرج المعمم (GGA).

كانت النتائج المتحصل عليها كالتالي:

✓ **الخصائص الهيكلية:** الخطوة الأكثر أهمية هي تحديد الخصائص الهيكلية لنظام معين في حالته الأساسية يمكن أن تحتوي سبائك كامل هوسلر Full-Heusler على نوعين مختلفين من الهياكل. وفقاً لحسابات الحالة، تكون مركباتنا مستقرة في الطور المغناطيسي من النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  والذي يسمح بتحديد وسائط التوازن المقابلة مثل ثابت الشبكة  $a$ ، وحجم  $V$ ، الكثافة.

✓ **الخصائص الإلكترونية و المغناطيسية:** من أحزمة الطاقة والكثافة الحالة الإلكترونية (DOS)، وجدنا فجوة (gap) عن وجود فجوة نطاق (gap) غير مباشرة عند مستوى فيرمي قيمتها  $E_g=2,62\text{eV}$ ،  $E_g=1.99\text{eV}$  للمركبين  $\text{NaVO}_2$  و  $\text{NaMnO}_2$  على الترتيب، وفجوة نطاق (gap) مباشرة عند مستوى فيرمي قيمتها  $E_g=0,47\text{eV}$  للمركب  $\text{NaVS}_2$ ، وبالتالي فإنها تحمل خاصية شبه موصل، وتداخل في أحزمة النطاق الغزل العلوي ( $\uparrow$  spin up).

أما بالنسبة للخصائص المغناطيسية، قمنا بحساب إجمالي العزم المغناطيسي لـ  $\text{NaMnZ}_2$  و  $\text{NaVZ}_2$  وكذلك العزم المغناطيسي لكل ذرة. فنلاحظ أن ذرة  $V$  مساهمة بدور كبير في الظاهرة المغناطيسية مقارنة بباقي الذرات في المركب  $\text{NaVZ}_2 (Z = O, S)$ ، وكذلك ذرة  $Mn$  مساهمة بدور كبير في هذه الظاهرة في

المركب  $\text{NaMnZ}_2$  ( $Z = \text{O, S}$ ) ، مع وجود استقطاب الدوران 100% والمركبات الاربعة خاضعة لقاعدة

سلاتر - بولينج Slater-Pauling :  $M_t = (Z_t - 12)$ .

نأمل أن يكون هذا العمل التمهيدي بمثابة مرجع لمزيد من الدراسات التجريبية لزيادة تعزيز التطبيقات

spintronic لهذه المركبات التي تمت دراستها  $\text{NaVO}_2$  و  $\text{NaVS}_2$  ،  $\text{NaMnO}_2$  ،  $\text{NaMnS}_2$  ، نقترح دراسة

الخصائص المرونية وخطوة إضافية لتأكيد استقرار سبائك هوسلر الكاملة Full-Heusler الخاصة بنا.

## ملخص

في هذا العمل، قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية، المغناطيسية للمركبات من النوع كامل هوسلر Full-Heusler وذلك باستخدام طريقة الأمواج المستوية (FP-LAPW) المدمجة في برنامج Wien2K في اطار نظرية دالة الكثافة DFT، استعملنا تقريب التدرج المعمم (GGA – PBE) لأجل حساب كمون التبادل والترابط، تم دراسة الاستقرار الفيزيائي للمركبات في التركيب البلوري المكعبي في الهيكليين: النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ، النوع  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ، قمنا بحساب ثابت الشبكة  $a(A^\circ)$  ومعاملات الانضغاط، العزوم المغناطيسية للنوع الأكثر استقرارا  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ، حزمة الطاقة وكثافة الحالة الكلية والجزئية للمركبات  $\text{NaVO}_2$  و  $\text{NaVS}_2$ ،  $\text{NaMnO}_2$ ،  $\text{NaMnS}_2$  ومنه يمكن القول أن هذه المركبات عبارة عن مواد نصف معدنية وهي خاضعة لقاعدة سلاتر- بولينج Slater-Pauling  $M_t = (Zt-12)\mu_B$ ، حيث تسمح هذه الخصائص لمركباتنا بأن تكون مرشحة لتطبيقات spintroniques.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons présenté une étude de premier principe des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés Full-Heusler. Cette étude est basée sur la méthode des ondes planes linéairement augmenter à potentiel total (FPLAPW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentée dans le code de calcul Wien2k. Pour le potentiel d'échange et corrélation, nous avons utilisé l'approximation de gradient généralisée (GGA-PBE). Nous avons commencé par étudier la stabilité physique et chimique des composés dans de type  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ . D'après nous avons calcul les paramètres de maille optimisés, les modules de compression et le moment magnétique pour le plus stable  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ . La structure de bande électroniques et la densité d'état totale et partielles montrent que  $\text{NaVO}_2$  et  $\text{NaVS}_2$ ,  $\text{NaMnO}_2$ ,  $\text{NaMnS}_2$  sont des demi-métaux ferromagnétiques qu'est on bon accord avec la règle de Slater-Pauling, Ces caractéristiques permis les composés d'être des bons candidats pour les applications spintroniques

## Abstract

In this work, we have used the first principal calculation to study the structural, electronic properties and magnetic of Full-Heusler compounds. Full potential linearized Augmented Planes waves (FP-LAPW) method was used in the frame work of the density functional theory DFT which is implemented in the Wien2k calculation code. For the exchange and correlation potential, we have used GGA-PBE. we have studied the physical and chemical stability of both compounds in  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ,  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  type. we have calculated the optimized lattice parameters  $a(A^\circ)$ , bulk moduli and magnetic moment for the most stable  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ . The electronic band structure and the total and partial density of states show that  $\text{NaVO}_2$  et  $\text{NaVS}_2$ ,  $\text{NaMnO}_2$ ,  $\text{NaMnS}_2$  are ferromagnetic demi-metals which are in good agreement with the Slater-Pauling rule. These characteristics indicate that our compounds are good candidates for spintronics applications.