

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Amar Telidji – Laghouat –



Faculté des sciences
Département des sciences de la matière

Mémoire

Présentée par

BENHORMA Fatima

Pour obtenir le diplôme de

Master

Option : physique des matériaux

THÈME

**Etude théorique basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité de
quelques alliages Half- Heusler**

Soutenue publiquement le/... devant le jury composé de :

Cheriet Abdelrahmenn	MAA	Université de Laghouat	Président
Lagoun Brahim	MCB	Université de Laghouat	Examineur
Maabed Said	MAA	Université de Laghouat	Examineur
Khenchoul Salah	MCB	Université de Laghouat	Encadreur

Remerciement

Avant tout, « Allah » qui m'a aidé à réaliser ce travail.

Je remercie Mon Enseignant

Mr KHANCHOUL SALEH

Votre compétence, votre encadrement ont toujours suscité mon profond respect.

Je vous remercie pour votre accueil et vos conseils.

Veillez trouver ici, l'expression de mes gratitude et de ma grande estime.

Mr LAGOUN IBRAHIM

J'ai eu l'honneur d'être parmi vos élèves et de bénéficier de votre riche enseignement.

Vos qualités pédagogiques et humaines sont pour moi un modèle.

Votre gentillesse, et votre disponibilité permanente ont toujours suscité mon admiration. Enfin je le remercie pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de juger ce travail.

Je tiens également à adresser mes remerciements

Mr .Cheriet Abderahmenn

D'avoir accepté de présider le jury de ma soutenance.

Je remercie vivement

Mr .MAABAD Saïd

D'avoir accepté d'examiner mon travail et pour leur aide et leur sympathie.

*Je dois un remerciement à tous les enseignants du LA
DEPARTEMENT DE SCIENCE DE LA MATIERE pour
leurs qualités scientifiques et pédagogiques.*



JE DÉDIE CETTE MÉMOIRE À ... ✍️



Ma très chère mère

Tu représentes pour moi le symbole de la bonté par excellence, la source de tendresse et l'exemple du dévouement qui n'a pas cessé de

m'encourager et de prier pour moi.

Ta prière et ta bénédiction m'ont été d'un grand secours pour mener à bien mes études.

Mon Père

Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous.

Ce travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et ma formation.

Mon Frère et mes sœurs

Omar, Bouthaina, Lina, Soumia

Mes chères amies

Rabab, Hayat, Sarah, Anfel, Awatif

*Ce Travail Est Dédié à Celles Et Ceux Qui M'ont
Donné Le Gout De La Recherche ; Et Qui M'ont
Soutenu Tout Au Long De Cette Année Mr
IBRAHIM LAGOUNE*

SOMMAIRE

Introduction générale	01
CHAPITRE I : Etat de l'art	
I.1 Introduction	04
I.2 Concept générale de la spintronique	04
I.3 La magnétorésistance géante (GMR)	04
I.4 La magnétorésistance tunnel (TMR)	06
I.5 La demi-métallicité	06
I.6 Les alliages Heusler	07
I.6.1 Les alliages half-Heusler	08
I.6.2 Les alliages full-Heusler	09
I.7 Conclusion	10
Référence	11
CHAPITRE II : Aperçu sur les méthodes de calcul	
II.1 Introduction	12
II.2 Equation de Schrödinger d'un cristal	12
II.3 Approximation de Born-Oppenheimer	13
II.4 Approximation de Hartree Fock	13
II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité(DFT)	16
II.5.1 Théorème de Hohenberg et Kohn	16
II.5.2 Les équations de Kohn et Sham	17
II.6 Traitement de la fonctionnelle échange-corrélation	18
II.6.1 Approximation de la densité locale (LDA)	18
II.6.2 Approximation du gradient généralisé (GGA)	19
II.7 Choix de potentiel et des bases	19
II.7.1 La méthode des ondes planes augmentées (APW)	19
II.7.2 La méthode des ondes planes augmentées linearisées (FP-LAPW)	20
II.8 Le code de calcul Wien2K	21
II.9 Conclusion	22
Référence	23
CHAPITRE III : Résultats et discussion	
III.1 Introduction	24
III.2 Détails de calculs	24
III.2.1 Méthode de calculs	24
III.2.2 Paramètres de calcul	24
III.2.3 Tests de convergence	26
III.3 Etude des propriétés structurales	31
III.4 Etude des propriétés magnétique	33

III.4.1 Moment magnétique	33
III.5 Etude des propriétés électroniques	34
III.5.1 Structures de bandes	34
III.5.2 La densité d'états (DOS)	35
III.6 Conclusion	40
Référence	41
Conclusion générale	44

LISTE DES FIGURES

Figure	Titre	Numéro
CHAPITRE I : GENERALITE SUR LES ALLIAGES HEUSLER		
Figure I.1	Alternance de couches ultraminces de Fer et de Chrome	05
Figure I.2	Configuration parallèle (a) et configuration antiparallèle (b).	05
Figure I.3	Principe des jonctions tunnel magnétiques	06
Figure I.4	Tableau périodique des éléments, présente les différentes combinaisons possibles pour former les alliages de type Heusler	08
Figure I.5	La structure cristalline des composés half-Heusler	09
Figure I.6	Les différents prototypes des alliages full-Heusler	09
CHAPITRE II : APERÇU SUR LES METHODES DE CALCUL		
Figure II.2	Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.	20
CHAPITRE III : RESULTAT ET DISCUSSION		
Figure III.1	Structure cristalline du IrMnAl	25
Figure III.2	Structure cristalline du IrMnGa	25
Figure III.3	convergence de E_{tot} en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ pour IrMnAl	27
Figure III.4	<i>convergence de E_{tot} en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ pour IrMnGa</i>	28
Figure III.5	convergence de (E_{tot}) en fonction de nK_{pt} pour IrMnAl	29
Figure III.6	convergence de (E_{tot}) en fonction de nK_{pt} pour IrMnGa	30
Figure III.7	L'énergie totale en fonction du volume du IrMnAl avec et sans spin polarisé	32
Figure III.8	L'énergie totale en fonction du volume du IrMnGa avec et sans spin polarisé	32
Figure III.9	La structure de bande de IrMnAl avec spin polarisé (a) "up" () et (b) "down" ().	34
Figure III.10	La structure de bande de IrMnGa avec spin polarisé (a) "up" () et (b) "down" ().	35
Figure III.11	La densité d'états totale de IrMnAl	36
Figure III.12	La densité d'états totale de IrMnGa	36
Figure III.13	La densité d'états partielle (Ir)	37
Figure III.14	La densité d'états partielle (Mn)	38
Figure III.15	La densité d'états partielle (Ir)	39
Figure III.16	La densité d'états partielle (Mn)	39

Figure III.17	La densité d'états partielle S pour (Al)	40
Figure III.18	La densité d'états partielle P pour (Al)	40
Figure III.19	La densité d'états partielle S pour (Ga)	41
Figure III.20	La densité d'états partielle P pour (Al)	41

LIST DES TABLEAUX

Figure	Titre	Numéro
CHAPITRE I : Etat de l'art		
Tableau(I.1)	Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$.	08
CHAPITRE III : RESULTAT ET DISCUSSION		
Tableau(III.1)	Convergence de (Etot) en fonction de Rmt*Kmax pour IrMnAl	26
Tableau(III.2)	Convergence de (Etot) en fonction de Rmt*Kmax pour IrMnGa	27
Tableau(III.3)	Convergence de (Etot) en fonction de nKpt pour IrMnAl	29
Tableau(III.4)	Convergence de (Etot) en fonction de nKpt pour IrMnGa	30
Tableau(III.5)	Paramètre du réseau (\AA), Module de compressibilité B (GPA), sa dérivé B'.	33
Tableau(III.6)	Les valeurs calculées du moment magnétique total, les moments magnétiques partiels en μ_B et la polarisation de spin pour les alliages IrMnX(X=Al,Ga)	33

LISTE DES SIGLES

Abréviations les plus couramment utilisées :

BZ	Brillouin Zone	Zone de Brillouin
DFT	Density Functional Théory	Théorie de la fonctionnelle de densité
LDA	Local Density Approximation	Approximation de la densité locale
GGA	Generalized Gradient Approximation	Approximation du gradient généralisé
PBE	Perdew, Burke, Ernzerhof	Perdew, Burke, Ernzerhof
XC	eXchange-Correlation	Échange-corrélation
APW	Augmented Plane Wave	onde plane augmentée
Fp-Lapw	Full Potential Linearized Augmented Plane Wave	onde plane augmentée linearisées à potentiel total
Dos	Density Of States	Densité d'état

UNITÉS

$$1\mu_B = \frac{e}{2m_e} = 9.273 \cdot 10^{-24} \text{A} \cdot \text{m}^2.$$

$$1\text{U.a.} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{m}$$

$$1\text{Ry} = 13.605 \text{eV}$$

Introduction générale

L'électronique conventionnelle est basée sur l'exploitation des charges électriques en contrôlant le courant qui est assuré par le mouvement des électrons, L'électron, en plus de sa masse et sa charge, possède aussi un moment magnétique de spin, cette propriété est quasiment ignoré lors de la quantification des phénomènes de transport. La spintronique (électronique de spin) est un domaine qui associe le contrôle de courant de spins et de charges. Cette nouvelle discipline quia été déclenché par la découverte de la magnétorésistance géante (en anglais giant magnetoresistance, (GMR)) indépendamment par A. Fert [1] et P. Grünberg [2], utilise les spins des électrons de conduction comme un degré de liberté supplémentaire. Ce nouveau champ technologique pourrait présenter des avantages considérables en alliant plus grande rapidité d'exécution et basse consommation d'énergie. Aujourd'hui, les applications principales de la spintronique promettent des applications en enregistrement magnétique, en électronique et en information quantique. La communauté scientifique a eu pendant cette dernière décennie beaucoup d'intérêt vis-à-vis les matériaux magnétiques tels que : les alliages d'Heusler, les pérovskites, les semi-conducteurs dilués magnétiques (DMS)... , afin de performer des dispositifs de la spintronique.

Le choix de ce thème a été motivé par les différentes difficultés rencontrées dans cette discipline, telle que la dépolarisation du courant par les renversements de spin. Ce phénomène qui est dû à la présence des entités magnétiques (les impuretés magnétique) et l'existence des interactions comme l'interaction spin-orbite. Parmi les solutions suggérées pour contourner ce problème est d'utiliser les alliages de types Heusler.

Les méthodes de calculs ab-initio ont acquis une place de choix dans le domaine des sciences des matériaux. Ils permettent la détermination des propriétés physiques des matériaux, et ont données des résultats fiables en les comparants avec les mesures expérimentales. Parmi les méthodes ab-initio les plus adoptées, est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)[3,4].

. Dans ce contexte, nous avons étudié des propriétés structurales, électroniques et magnétique des alliages half-Heusler IrMnX ($X=\text{Al,Ga}$).

Ce manuscrit comporte trois chapitres :

Le premier chapitre, présente un aperçu sur la spintronique et ses applications les plus répondues. Ainsi, nous exposerons au cours de cette partie des généralités sur les alliages Heusler.

Le deuxième chapitre donne une idée générale sur l'ensemble des outils numériques. Nous avons détaillé certains aspects de la DFT, en mettant l'accent sur la méthode des ondes plane linearisées et augmentée et ce concept du potentiel total (FP-LAPW) utilisée dans cette étude ainsi le codeWien2K [5].

Le dernier chapitre regroupe nos résultats ainsi une discussion des calculs effectués.

Enfin une conclusion récapitule l'essentiel des points abordés.

Références

- [1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, Phys Rev Lett. 61 (1988).
- [2] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys Rev B. 39 (1989).
- [3] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B, 136, (1964) 864.
- [4] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. A 140 (1965) 1133.
- [5] P. Blaha, K. Schwarz, and P. Dufek, WIEN2K. (1997).

I.1 Introduction

Ces deux dernières décennies, les alliages Heusler ont reçu un grand intérêt qui s'explique par différentes propriétés qui sont bien adaptées pour des applications dans des dispositifs à spintronique. Dans ce chapitre nous venons de décrire les briques de base de la spintronique et ainsi nous donnons des généralités sur les alliages de types Heusler.

I.2 Concept générale de la spintronique

La spintronique est un domaine émergent de l'électronique, où les systèmes fonctionnent en jouant sur le spin des électrons, plutôt que leur charge. Cette méthode pourrait remplacer les technologies actuelles, et laisse entrevoir de grandes promesses : un transfert de données plus rapide, de plus grandes puissances de traitement ainsi que des capacités de stockage accrues. Il s'agit de manipuler le spin. L'idée générale de la spintronique est de placer sur le trajet des électrons des matériaux aimantés est d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott [1] en 1936, a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60[2]. La découverte de la magnétorésistance géante (GMR) [3] a conduit aux premières utilisations pratiques de cette influence. De nombreux autres phénomènes exploitant aussi le spin des électrons se sont ensuite révélés et, aujourd'hui, la spintronique se développe dans de très nombreuses directions : magnétorésistance tunnel, phénomènes de transfert de spin, spintronique moléculaire, etc...

I.3 La magnétorésistance géante (GMR)

L'influence du spin sur la conduction électrique dans les métaux ferromagnétiques fut proposée par Mott [1] en 1936, pour expliquer certaines anomalies de la résistivité de ces métaux au voisinage de la température de Curie. Les états autour du niveau de Fermi - responsable de la conduction électrique - induisent une conductivité différente si l'on tient compte du spin ; on peut donc définir deux courants, un de spin up et l'autre de spin down. Elle est à l'origine de la magnétorésistance géante qui exploite l'influence des propriétés quantiques du spin de l'électron sur la mobilité des électrons dans un métal ferromagnétique.

Le système le plus simple mettant en évidence la magnétorésistance géante consiste en une multicouche ou une bicouche (vannes de spin) de fer/chrome où les deux couches de fer

séparées par une couche non magnétique très mince (de l'ordre du nanomètre), comme indiqué sur la figure ci-dessous.

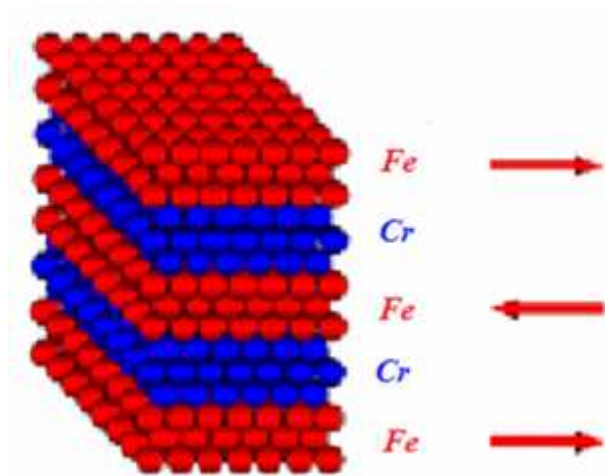


Figure 1.1 : Alternance de couches ultraminces de Fer et de Chrome [3].

Si la direction de l'aimantation est identique dans les deux couches magnétiques, les électrons de spin parallèle peuvent se propager facilement. Les électrons de spin antiparallèle, par contre, entrent en collisions. La résistance totale reste cependant faible. Si les directions d'aimantation dans les deux couches magnétiques sont opposées, les électrons vont tous être antiparallèles dans l'une des deux couches, subissant de nombreuses collisions. La résistance totale sera surélevée.

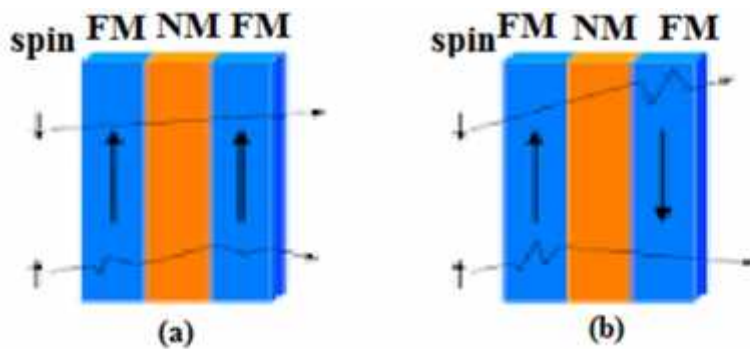


Figure 1.2 : Configuration parallèle (a) et configuration antiparallèle (b). [3]

Si on applique un champ magnétique la configuration passe d'un état antiparallèle à état parallèle. Ce passage s'accompagne d'une forte baisse de la résistance électrique : c'est l'effet de

magnétorésistance géante, comme l'indique la figure (1.6). Le rapport de magnétorésistance, et donné par [4] :

$$MR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} \quad (I.1)$$

R_{AP} est la résistivité mesurée dans la configuration antiparallèle et R_P est la résistivité mesurée dans l'état parallèle. Le phénomène de magnétorésistance géante est très utilisé dans les têtes de lecture GMR des disques durs modernes. Les mémoires magnétiques non volatiles (ou MRAM) en sont une autre application. Cette technologie est très prometteuse pour remplacer un certain nombre de disques durs sous la forme de SSD.

I.4 La magnétorésistance tunnel (TMR)

On s'intéresse maintenant, aux propriétés de jonctions magnétiques à effet tunnel (JMT), constituées par deux électrodes ferromagnétiques séparées par un isolant ultraminece (les premières jonctions magnétiques tunnel avaient été étudiées en 1975 [5]). Leur principe de fonctionnement est illustré sur la figure (I.3). Si les moments magnétiques des deux ferromagnétiques sont parallèles, il y a beaucoup d'états disponibles dans l'électrode de droite pour les nombreux électrons à spin \downarrow présents au niveau de Fermi dans celle de gauche. Si en revanche l'aimantation de l'électrode de droite est retournée, et celle de gauche inchangée, il y a très peu de places disponibles pour le transfert d'électrons par effet tunnel à travers la jonction, et la conductance de celle-ci est plus faible que dans le cas précédent.

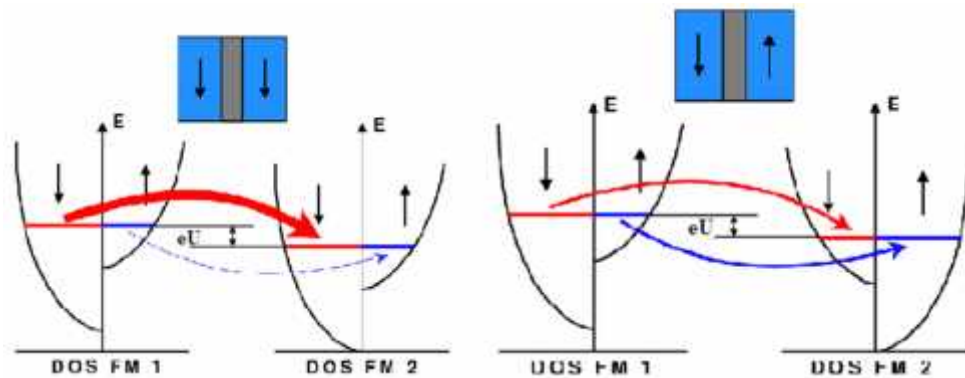


Figure 1.3 : Principe des jonctions tunnel magnétiques [5,6].

La résistance globale de la jonction tunnel magnétique dans l'état parallèle est donnée par :

$$TMR = \frac{R_{\uparrow\downarrow} - R_{\uparrow\uparrow}}{R_{\uparrow\uparrow}} \quad (I.2)$$

Où R_{\downarrow} est la résistivité mesurée dans la configuration antiparallèle et R_{\uparrow} est la résistivité mesurée dans l'état parallèle.

I.5 La demi-métallicité

Une étape cruciale dans le développement de cette technologie à base de spin et de la prochaine génération des dispositifs est le développement de matériaux pour ce domaine, la communauté scientifique a eu pour les deux dernières décennies, beaucoup d'intérêt vis-à-vis des matériaux qui présentent des propriétés magnétiques afin de performer des dispositifs de spintronique tel que : Les semi-conducteurs magnétiques dilués (exemple : GaAs, InAs ... dopé avec un métal de transition) et que l'on appelle les demi-métaux.

Normalement, un matériau non-ferromagnétique tel que le silicium (Si), par exemple, le nombre états énergétiques occupés par les électrons ont un spin up et celle de spin down sont égaux. On dit que ce matériau n'est pas polarisé en spin. La polarisation de spin est défini par [7] :

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \quad (I.3)$$

N_{\uparrow} et N_{\downarrow} sont les nombre des états énergétique de spin up et de spin down au niveau de Fermi E_F , respectivement.

de Groot et al [8] prédit une propriété remarquable dans l'alliage half-Heusler, NiMnSb, dans ce composé, les états de spin \uparrow présentent un comportement d'un métal, tandis que les états de spin \downarrow présentent un caractère d'un isolant. Au niveau de Fermi E_F le nombre des états N_{\downarrow} s'annule, ce qui correspond à une polarisation de spin $P=100\%$. Cette propriété définit par la demi-métallicité et les matériaux possédant ce comportement sont appelés les demi-métaux (HM).

I.6 Les alliages Heusler

Ces composés ont été découverts la première fois par Fritz Heusler en 1903 tandis qu'il travaillait sur le ferromagnétisme de l'alliage Cu_2MnAl [9]. (La figure I.4) donne un aperçu sur des combinaisons possibles en formant deux types des alliages Heusler [10].

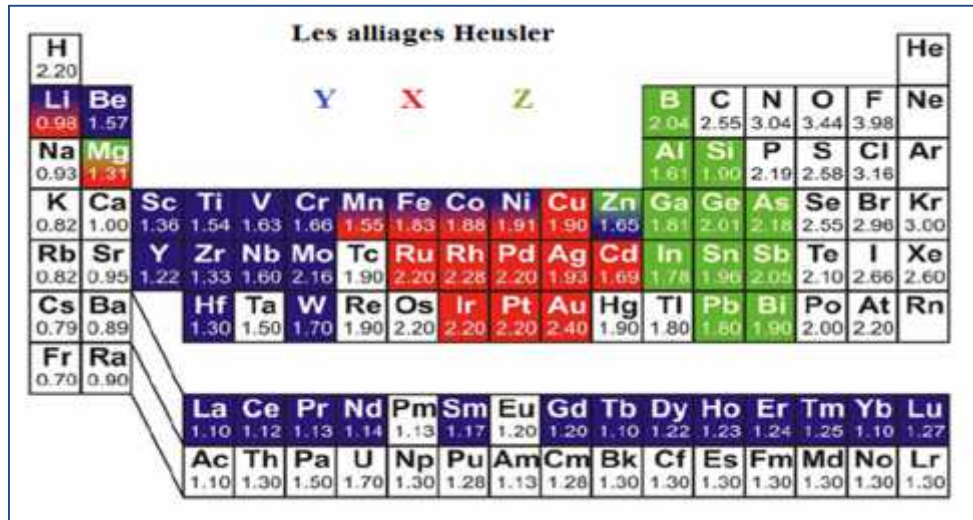


Figure I.4 : Tableau périodique des éléments, présente les différentes combinaisons possibles pour former les alliages de type Heusler [11]

Ces deux types sont :

I.6.1 Les alliages half-Heusler :

Avec une formule chimique XYZ, où X et Y sont des métaux de transition. Z est un élément des groupes III à V (dans certains cas Y est remplacé par un terre rare ou un alcalino-terreux). Un alliage half-Heusler se cristallise dans le prototype $C1_b$, il appartient au groupe d'espace $F4\bar{3}m$ ($N^\circ=216$). Ce type de structure est caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (CFC), dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z. Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4). En principe, trois arrangements atomiques non équivalents sont possibles dans ce type de structure, comme il résume le tableau (I.1).

Tableau I.1. Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$.

	4a	4b	4c
Type 1	X	Y	Z
Type 2	Z	X	Y
Type 3	Y	Z	X

La figure 1.5 présente la distribution des atomes dans un cristal de type half-Heusler

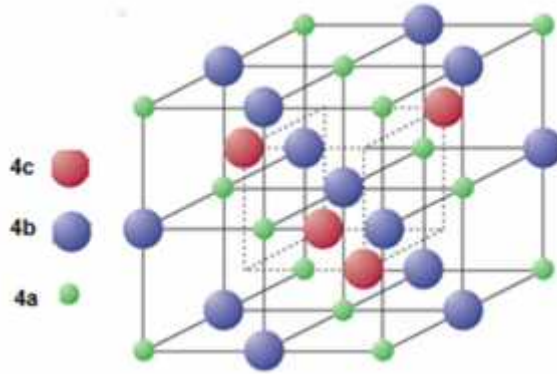


Figure 1.5 : La structure cristalline des composés half-Heusler [12].

I.6.2 Les alliages full-Heusler :

Avec une formule chimique X_2YZ . Un alliage full-Heusler se cristallise dans le prototype $L2_1$, il appartient au groupe d'espace $Fm\bar{3}m$ ($N^{\circ}=225$). Dans les alliages full-Heusler, les atomes X occupent la position de Wyckoff 8c ($1/4, 1/4, 1/4$), les atomes Y et les atomes Z sont situés aux positions 4a ($0, 0, 0$) et 4b ($1/2, 1/2, 1/2$), respectivement. Bien que les atomes X, Y et Z éléments peuvent se combiner pour former une structure parfaitement ordonnée, en principe, il y a un nombre infini de façons dont les atomes peuvent être répartis entre les quatre sous-réseaux. Les types les plus simples de désordre sont les B_2 et structures A_2 (voir la figure (I.6)). Dans le cas de la structure B_2 les positions 4a ($0, 0, 0$) et 4b ($1/2, 1/2, 1/2$), sont remplis avec les atomes Y et Z, hasardeusement. Alors que dans la structure A_2 , tous les atomes sont distribués aléatoirement sur les sites atomiques du prototype $L2_1$, résultant un désordonné complet.

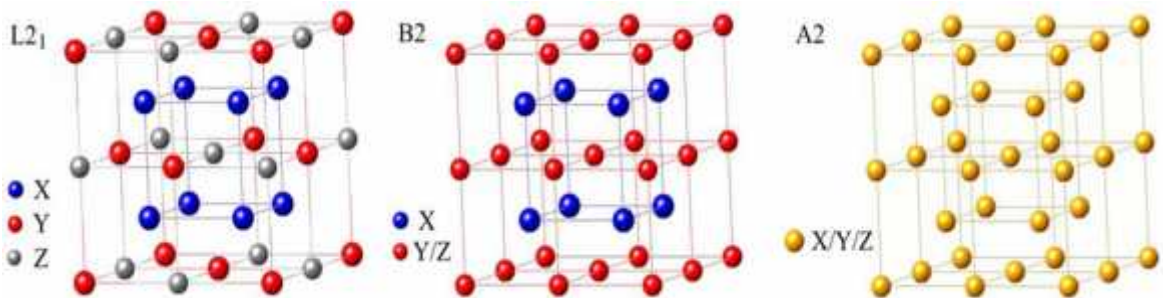


Figure 1.6 : Les différents prototypes des alliages full-Heusler [12].

I.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé des notions en spintronique et ainsi les difficultés endurées dans ce domaine. Nous avons terminé ce chapitre par des généralités sur des matériaux proposés comme des solutions de la spintronique qui sont les alliages Heusler.

Références

- [1] N.F. Mott, Proc. Roy. Soc.A, 153 (1936) 699.
- [2] B. Loegel et F. Gautier, J. Phys. Chem. Sol. 32 (1971) 2723.
- [3] A. Fert, J. A. Katine, R. A. Buhran, D. C. Ralph, Appl. Phys. Lett., Vol. 77, (2000), 3809-3811.
- [4] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff, , Phys. Rev. Lett. 61 (1988).
- [5] M. Julliere, Phys. Lett., Vol. 54A, n°3, (1975), 225-226.
- [6] J.S. Moodera, L. R. Kinder, J. Appl. Phys., Vol. 79, n°8, 1996, p. 4724-4729.
- [7] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip and B. J. van Wees, Phys. Rev. B 62, (2000), 4790
- [8] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50, (1983), 2024.
- [9] F. Heusler, “Über magnetische Manganlegierungen,” Verhandlungen Dtsch. Phys. Ges., vol. 5, p. 219, 1903.
- [10] A. Hirohata, M. Kikuchi, N. Tezuka, K. Inomata, J. Claydon, Y. Xu, and G. Vanderlaan, “Heusler alloy/semiconductor hybrid structures,” Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., vol. 10, no. 2, pp. 93–107, Apr. 2006.
- [11] H. Zenasni, these de doctorat « Etude Theorique des propriétés magnétique, électronique et structurales des alliages Heusler », Université Abou Bakr Belkaid, Tlemcen, (2013).
- [12] C. Felser, A. Hirohata, Heusler alloys, Springer, (2015).

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous venons de décrire la théorie sur laquelle repose le code WIEN2K utilisé dans ce mémoire. Nous donnerons tout d'abord les principes de base des calculs de premier principe, en mettant l'accent sur la méthode des ondes planes augmentées linearisées.

II.2 Equation de Schrödinger d'un cristal

Un cristal est constitué d'un très grand nombre de particules en interaction : Les électrons qui sont des particules légères et les noyaux qui sont beaucoup plus lourds.

Définie les positions des électrons par $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots$ et par $\vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots$, celles des noyaux.

Le problème général est d'essayer de calculer toutes les propriétés des systèmes à l'aide de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{II.1})$$

Où H est l'opérateur hamiltonien du cristal. sa fonction propre et E l'énergie propre du système. L'hamiltonien H est donné par :

$$H_{tot} = T_e + T_N + V_{e-e} + V_{N-N} + V_{e-N} \quad (\text{II.2})$$

Tel que :

$$T_e = - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i \quad (\text{II.3})$$

l'énergie cinétique des électrons.

$$T_N = - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_l \Delta_l \quad (\text{II.4})$$

l'énergie cinétique des noyaux.

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} = \frac{1}{2} \sum \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.5})$$

l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

$$V_{N-N} = \frac{1}{2} \sum_{k,l} U_{kl} = \frac{1}{2} \sum \frac{Z_k Z_l e^2}{4\pi\epsilon |\vec{R}_k - \vec{R}_l|} \quad (\text{II.6})$$

l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

$$V_{e-N} = \frac{1}{2} \sum U_{lk} = \frac{1}{2} \sum \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\bar{R}_k - \bar{r}_l|} \quad (\text{II.7})$$

l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

e = la charge de l'électron ; m = la masse de l'électron ; M = masse de noyau.

\bar{r}_l : définit les positions des électrons (i) .

\bar{R}_l : définit les positions des noyaux (I).

Z_l : est le nombre atomique des noyaux (I) [1].

La solution de l'équation (II. 1) avec H_{tot} conduit à la résolution d'un problème à N corps [1]. La mécanique quantique ne dispose aucune méthode pour résoudre des problèmes concernant un grand nombre de particules. Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système de particules se trouvant en interaction, on doit faire des approximations.

II.3 Approximation de Born-Oppenheimer

Selon Born et Oppenheimer, du fait que les noyaux sont plus lourds que les électrons et donc plus lents [2], on peut négliger leurs mouvements et on ne prend en compte que l'énergie cinétique des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires. L'énergie potentielle noyaux-noyaux V_{N-N} devient une constante et le hamiltonien électronique est donné par :

$$H_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-N} \quad (\text{II. 8})$$

On a donc réduit la complexité du problème. Mais la solution de l'équation (II.1) reste toujours difficile. Il faut faire d'autres approximations pour résoudre ce problème.

II.4 Approximation de Hartree Fock

Dans son énonciation traditionnelle, la théorie de Hartree-Fock n'utilise pas le formalisme de la seconde quantification. Pour contourner le problème poly électronique et de se rapprocher du problème à un électron, on fait appel à l'approximation mono électronique qui Consiste à considérer chaque électron comme étant indépendant mais subissant un potentiel $E_{\text{effectif}} V_{\text{eff}}$, qui doit tenir compte de toutes les interactions électroniques. Hartree [3] à proposer l'hypothèse du champ moyen qui stipule que chaque électron évolue dans un potentiel effectif généré par les noyaux et les autres électrons. Dans l'approximation de Hartree, la fonction d'onde totale

$(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots \dots, \vec{r}_4)$ est remplacée par un produit direct d'orbitales moléculaires qui contient l'information de spin, ou plus simple spin-orbitales :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots \dots, \vec{r}_4) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) \dots \Psi_N(\vec{r}_N) \quad (\text{II. 9})$$

Dans ce cas, chacune de ces fonctions d'onde mono électronique est alors une solution de :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{eff} \Psi_l = \epsilon_l \Psi_l \quad (\text{II. 10})$$

Avec

$$V_{eff} = V_{Hartree} + V_{noyaux} \quad (\text{II. 11})$$

Où V_{noyaux} et $V_{Hartree}$ sont respectivement le potentiel dû aux noyaux et le champ moyen représentant l'interaction coulombienne avec les autres électrons, appelé potentiel de Hartree. Les deux termes sont exprimés par :

$$V_{Hartree} = \int d\vec{r}' \Psi_j^* \vec{r}' \Psi_l \vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \quad (\text{II. 12})$$

$$V_{noyaux} = - \sum_l \frac{Z_l e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_l|} \quad (\text{II. 13})$$

L'approximation proposée par Hartree a été corrigée par Fock [4], qui a expliqué que la fonction d'onde de Hartree ne satisfait pas le principe d'exclusion de Pauli, selon lequel cette fonction doit être antisymétrique par permutation des électrons. Il a aussi montré que par des additions et soustractions appropriées de toutes les permutations des produits de type Hartree, on peut construire une fonction qui ait la propriété exigée par le Principe d'Exclusion. Le type de fonction proposé est connu aujourd'hui sous le nom de fonction de Hartree-Fock. Ensuite, Slater a remarqué que la fonction résultante est un simple déterminant d'une matrice, nommée le déterminant de Slater [5]. Afin de tenir en compte du spin, on considère des états à 1-particule de la forme :

$$\Psi_l(\vec{r}, \sigma) = u_l(\vec{r}) \chi_l(\sigma) \quad (\text{II. 14})$$

$u_l(\vec{r})$ est la partie spatiale ne dépendant que de la position et $\chi_l(\sigma)$ la partie de spin. Avec une relation d'orthogonalité :

$$\int d\vec{r} u_l(\vec{r}) u_j(\vec{r}) \chi_l(\sigma) \chi_j(\sigma) = \delta_{l,j} \quad (\text{II. 15})$$

Le déterminant de Slater peut s'écrire de la manière suivante :

$$\Psi_{\text{e}l\text{e}}^{\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \vec{r}_3\sigma_3, \dots, \vec{r}_N\sigma_N} = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \Psi_1 \vec{r}_1, \sigma_1 & \dots & \Psi_1 \vec{r}_N, \sigma_N \\ \vdots & & \vdots \\ \Psi_N \vec{r}_1, \sigma_1 & \dots & \Psi_N \vec{r}_N, \sigma_N \end{vmatrix} \quad (\text{II.16})$$

On cherche à calculer l'énergie, c'est-à-dire $\langle \Psi | \hat{H}_{\text{e}l\text{e}} | \Psi \rangle$. Pour simplifier les calculs, on sépare l'hamiltonien en deux parties :

$$\hat{H}_{\text{e}l\text{e}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_i \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_i \hat{h}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.17})$$

\hat{h}_i est l'hamiltonien relatif à l'électron i associé à l'énergie cinétique ainsi qu'à l'interaction coulombienne avec les noyaux. L'énergie totale s'écrit :

$$\langle \Psi | \hat{H}_{\text{e}l\text{e}} | \Psi \rangle = \sum_i \langle \Psi | \hat{h}_i | \Psi \rangle + \frac{e^2}{2} \sum_{i,j} \langle \Psi | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \Psi \rangle \quad (\text{II.18})$$

Par l'application du principe variationnel, on peut extraire l'équation de Hartree et Fock :

$$\hat{h}_i u_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) u_i(\vec{r}) + \int d\vec{r}' V_{e,x}(\vec{r}, \vec{r}') u_i(\vec{r}') = \varepsilon_i u_i(\vec{r}) \quad (\text{II.19})$$

Où les potentiels $V_H(\vec{r})$ et $V_{e,x}(\vec{r}, \vec{r}')$ sont respectivement :

$$V_H(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} |u_i(\vec{r}')|^2 \quad (\text{II.20})$$

$$V_{e,x}(\vec{r}, \vec{r}') = - \sum_{i,j} \delta_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} u_i(\vec{r}') u_j(\vec{r}') \quad (\text{II.21})$$

L'équation (II.19) est une équation integro-différentielle, qu'il faut la résoudre d'une façon auto-cohérente. Formellement, cette équation ressemble à une équation de Schrödinger d'une particule, à la différence que le potentiel $V_{e,x}(\vec{r}, \vec{r}')$ est appelé le terme de Fock ou le terme d'échange, il s'agit d'un potentiel non-local provient de l'antisymétrie de la fonction d'onde.

II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité(DFT)

La théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) décrit un système en considérant la densité $\rho(\vec{r})$ comme la grandeur de base. Ainsi, le problème à N électrons est étudié dans l'espace de $\rho(\vec{r})$ qui est de dimension 3 au lieu de l'espace de $3n$ de la fonction d'onde ψ . Historiquement, les premières idées dans ce sens furent introduites dans les travaux de Thomas [6] et Fermi [7] en 1927. Dans leur modèle, les interactions électroniques sont traitées classiquement et l'énergie cinétique est calculée sur la base d'une densité électronique homogène. Notons cependant que la DFT a réellement été établie avec les théorèmes fondamentaux exacts de Hohenberg et Kohn en 1964 [8] qui relie l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique.

II.5.1 Théorème de Hohenberg et Kohn

Le développement de la théorie de la fonctionnelle de densité a commencé dans les années 1964 et 1965 avec les publications de Hohenberg et Kohn (1964) [9]. Les deux théorèmes sont comme suit :

● Premier théorème de Hohenberg et Kohn

«L'énergie totale de l'état fondamental E est une fonctionnelle unique de la densité des particules $\rho(\vec{r})$ pour un potentiel externe $V_{ext}(\vec{r})$ donné.»

Ce théorème met en évidence une correspondance unique entre le potentiel extérieur et la densité électronique. Puisque celle-ci fixe le nombre d'électrons, alors elle détermine aussi de manière unique la fonction d'onde et par là les propriétés électroniques du système. Ainsi, pour un système donné, l'énergie s'écrit comme il suit:

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + V_{ee}[\rho(\vec{r})] + V_{ext}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II.22})$$

$$E[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{II.23})$$

Avec :

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + V_{ee}[\rho(\vec{r})]$$

Qui est la fonctionnelle de Hohenberg-Kohn contenant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle dues à l'interaction répulsive électron-électron.

● Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn

Le deuxième théorème fondateur de la DFT s'énonce : « L'énergie atteint son minimum pour la densité réelle. Par conséquent, la densité de l'état fondamental peut être obtenue à partir du principe variationnel »

Ce deuxième théorème découle du fait que, La fonctionnelle de l'énergie totale de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental. La densité de particules de l'état fondamental vérifie :

$$E[\rho_0] = \text{Min} E[\rho] \quad (\text{II.24})$$

Hohenberg et Kohn ont montré que la vraie densité de l'état fondamental c'est celle qui minimise l'énergie $E[\rho]$, et toutes les autres propriétés sont aussi une fonctionnelle de cette densité. L'énergie de l'état fondamental d'un système électronique dans un potentiel extérieur est déterminée par la méthode variationnelle.

II.5.2 Les équations de Kohn et Sham « 1965 »

Ces équations ont pour objectif la détermination des fonctions d'ondes électroniques qui minimisent l'énergie totale. Les fonctions d'ondes sont déterminées à partir d'une équation similaire à l'équation de Schrödinger d'une manière autocohérente. L'équation est donnée par [10] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.25})$$

$\psi_i(\vec{r})$: La fonction d'onde de l'électron i .

$V_{ext}(\vec{r})$: Le potentiel extérieur.

$V_H(\vec{r})$: Le terme de Hartree donné par :

$$V_H(\vec{r}) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \int \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{II.26})$$

Le potentiel d'échange-corrélation est obtenu à partir de la dérivée de l'énergie d'échange-corrélation E_{XC} par rapport à la densité :

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (\text{II.27})$$

Donc les équations de Kohn –Sham peuvent s’écrire sous la forme :

$$H_i \psi_i(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) + V_{eff}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.28})$$

Où chaque électron subit l’effet du potentiel effectif créé par tous les noyaux et les autres électrons, ce potentiel est donné par :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + V_{XC}(\vec{r}) \quad (\text{II.29})$$

Jusqu’ici la DFT est une méthode exacte, mais pour que la DFT et les équations de Kohn-Sham deviennent utilisables dans la pratique, on a besoin de proposer une formule pour $E_{XC}[\rho]$ et pour cela, on est obligé de passer par des approximations [11].

II.6 Traitement de la fonctionnelle échange-corrélation

Un des enjeux essentiels de la DFT est de trouver la meilleure expression possible pour $E_{XC}[\rho(\vec{r})]$. C’est l’exactitude de ce terme qui rendrait la modélisation selon la DFT fiable. En théorie, des différentes approximations sont proposées afin d’améliorer le traitement de cette fonctionnelle. Dans cette section nous allons donner un aperçu sur les fonctionnelles d’échange adoptées dans ce travail.

II.6.1 Approximation de la densité locale (LDA)

L’approche la plus simple est la même que celle utilisée pour l’énergie cinétique dans l’approximation de Thomas-Fermi : on suppose que la densité d’énergie d’échange-corrélation est la même que celle d’un gaz d’électrons homogène. L’énergie d’échange-corrélation s’exprime alors de la manière suivante :

$$E_{XC}^{LDA} = \int \epsilon_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{II.30})$$

$\epsilon_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ est la densité d’énergie par particule d’échange-corrélation d’un gaz d’électrons uniforme de densité $\rho(\vec{r})$. Ce terme peut se diviser en deux parties : $\epsilon_X^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ une contribution d’échange et une contribution de corrélation $\epsilon_C^{LDA}[\rho(\vec{r})]$. La contribution provenant de l’échange électronique dans l’approximation de la densité locale est connue et provient de la fonctionnelle d’énergie d’échange formulée par Dirac [12] :

$$\varepsilon_C^{LDA}(\rho, \vec{r}) = -\frac{3}{4} \frac{3\rho(\vec{r})}{\pi} \quad (II.31)$$

Dans l'approximation LDA, le potentiel d'échange-corrélation au point \vec{r} ne dépend que de la densité au point \vec{r} , il est donc local.

Pour la partie de corrélation, Plusieurs paramétrisations ont été proposées on cite :

La paramétrisation de von-Barth et Hedin (1972) [13], Vosko et al (1980) [14], et Perdew et Zunger (1981) [15], etc....

II.6.2 Approximation du gradient généralisé (GGA)

Les méthodes reposant sur l'approximation LDA supposent que dans chaque élément infinitésimal de volume dV , la densité électronique soit uniforme. Cette hypothèse est levée dans la méthode du gradient généralisé, où l'on postule que la fonctionnelle d'échange-corrélation dépend non seulement de la densité mais également du son gradient. De cette façon de procéder est souvent considérée comme une approche semi-locale. De façon générale, la fonctionnelle GGA d'échange-corrélation, s'exprime comme suit : [16]

$$E_{XC}^{GGA}[\rho, \nabla\rho] = \int \varepsilon_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (II.32)$$

II.7 Choix de potentiel et des bases

Plusieurs méthodes de calcul de structure électronique existent. Leur point commun est la résolution des équations de Kohn et Sham d'une manière auto-cohérente. Leurs spécificités respectives se résident au niveau de la façon de représenter le potentiel, la densité électronique et surtout les orbitales mono-électroniques de Kohn et Sham. Pour le potentiel, on distingue ainsi deux catégories : les potentiels tout électron (FP) et les pseudos potentiels [17]. Parmi ces méthodes on rencontre celle utilisée dans nos calculs : la méthode des ondes planes augmentées linearisées "Full Potential Linearized Augmented Plane Waves" (FP-LAPW).

II.7.1 La méthode des ondes planes augmentées (APW)

Slater [18] considère que l'espace est divisé en deux types de régions :

- La région I correspond à des sphères atomiques ne se recouvrant pas, de rayon R_{mt} (mt = muffin tin), ou on utilise une série de combinaisons linéaires de fonctions radiales et angulaires (atomic like functions).

● La région II est la région interstitielle entre les sphères. Elle est décrite par une expansion d'ondes planes [19].

Les deux types de région, représentées schématiquement sur la Figure (II-2).

Donc la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \psi_I(\vec{r}) &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \cdot \vec{r}} & \text{si } r > R_0 \\ \psi_S(\vec{r}) &= \sum_{l,m} A_{lm} U_l(\vec{r}, E_l) Y_l^m(\vec{r}) & \text{si } r < R_0 \end{aligned} \quad (\text{II.33})$$

Ω : Volume de la maille unitaire.

Y_{lm} : Les harmoniques sphériques.

$C_{\vec{G}}$: Coefficients de développement.

$U_l(\vec{r})$: la solution régulière de l'équation suivante :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} \quad (\text{II.34})$$

Où E_l : paramètre d'énergie.

$V(r)$: Le composant sphérique du potentiel dans la sphère [20].

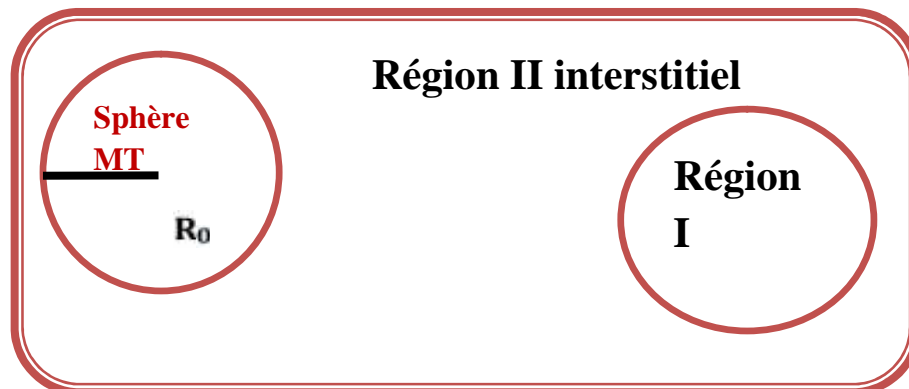


Figure II.2 : Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.

II.7.2 La méthode des ondes planes augmentées linearisées (FP-LAPW)

Dans la méthode des ondes planes augmentées linearisées (LAPW : Linearized Augmented Plane Wave), les fonctions de base à l'intérieur de la sphère « Muffin-tin » sont une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_{l,m}(\vec{r}, E_l) Y_l^m(\vec{r})$ et leurs dérivées par rapport à l'énergie $U_{l,m}(\vec{r}, E_l) Y_l^m(\vec{r})$. Les fonctions $U_{l,m}(\vec{r}, E_l) Y_l^m(\vec{r})$ sont définies comme dans la méthode APW, mais l'énergie E_l est fixe et les fonctions $U_{l,m}(\vec{r}, E_l) Y_l^m(\vec{r})$ doivent satisfaire la condition suivante :

$$\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \quad rU_{l,m} = rU_{l,m} \quad (\text{II.35})$$

Les fonctions de bases sont données par :

$$\psi_l(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{G} + \vec{k}) \cdot \vec{r}} & \text{si } r > R_0 \\ \sum_{l,m} [A_{lm} U_l(r, E_l) + B_{lm} U_{l,m}(r, E_l)] Y_l^m(\vec{r}) & \text{si } r < R_0 \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

Où $B_{l,m}$ sont les coefficients correspondant à la fonction $U_l(r, E_l)$ et sont de même nature que les coefficients A_{lm} . Dans la méthode LAPW on utilise les ondes planes dans la région interstitielle. Alors que dans la région des sphères « Muffin-tin » on utilise les ondes planes augmentées linearisées. En résumant quelques avantages de la méthode LAPW par rapport à la méthode APW, on note :

- Dans la méthode LAPW, les énergies des bandes au point k sont obtenues avec une seule diagonalisation. Alors que dans la méthode APW, il est nécessaire de calculer l'énergie pour chaque bande.
- Le temps de calcul est réduit car les énergies des bandes à un point donné (k) sont obtenues avec une seule diagonalisation, ce qui n'est pas le cas de la méthode APW.
- La convergence est devenue plus rapide dans LAPW en comparaison avec la méthode APW [21].

II.8 Le code de calcul Wien2K

Historiquement, Wien2k a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwartz de l'institut de Chimie des matériaux d'Université Technique de Vienne (Autriche). Ce code a été distribué pour la première fois en 1990. Les versions suivantes ont été appelées, selon l'année de leur parution : WIEN93, WIEN95 et WIEN97, Wien2k (année 2000)

Une application réussie de la méthode FP-LAPW est le programme Wien, un code développé par Blaha, Schwartz et Luitz [22]. Il a été appliqué avec succès pour le gradient du champ électrique [23,24], les systèmes supraconducteurs à haute température, les minéraux, les surfaces des métaux de transition [25], les oxydes non ferromagnétiques [26] et même les molécules [27].

La structure de ce code est constituée de plusieurs sous-programmes indépendants, liés par un script de type C-Shell. La procédure de calcul ab initio dans le code WIEN2k se divise en deux étapes majeures. Dans un premier temps, l'initialisation consiste à générer la densité électronique

de départ, à partir d'un calcul atomique. Une fois le calcul auto-cohérent achevé, les propriétés caractéristiques de l'état fondamental, comme par exemple la densité de charge ou la structure de bandes, sont alors déterminées

II.10 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'une part présenté les principes fondamentaux de la DFT, utilisée tout au long de cette mémoire. Ses différentes possibilités d'implémentations ont été décrites. Dans ce manuscrit, les calculs DFT ont été réalisés à l'aide d'une approche de type tous électrons (FP-LAPW, logiciel Wien2k).

Aujourd'hui, les méthodes de calcul constituent un formidable outil dans l'étude d'un matériau, soit en justifiant ou en complétant les informations fournies par l'expérience, soit en anticipant sur de nouvelles propriétés jusque-là inexplorées.

Reference

- [1] N.W. Ashcroft, and N. d. Mermin .solid state Physic Ed. Holt, Rene hart and Winston hiladelphia, (1976).
- [2] M.Born, J.R. Oppenheimer, Ann .Phys, 87, 457 (1927).
- [3] D.R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24 (1928) 89.
- [4] V. Fock. Z. Phys., 61 (1930) 126.
- [5] J. C. Slater, Phys. Rev. 32 (1928) 339.
- [6] L. H. Thomas. Proc. Camb. Philos. Soc. 23, 542 (1927).
- [7] E. Fermi, Z. Phys. 48, 73 (1928).
- [8] P. Hohenberg and W.Kohn, Phys. Rev 136, 864 (1964).
- [9] P. Hohenberg , W. Kohn, Phys. Rev. B 136,864 (1964).
- [10] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 1133, 140 (1965).
- [11] L.J.Sham, W.Kohn, Phys.Rev 145, 561 (1966).
- [12] P.A.M. Dirac, Proc. Cambridge Philos. Soc., 26 (1930) 376.
- [13] U. Van Barth and L. Hedin, J. Phys. C 5, 1629 (1972).
- [14] S.H. Vosko, L. Wilk and M. Nusair, Can. J. Phys. 58 (1980) 1200.
- [15] J.P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23 (1981) 5048.
- [16] J. P. Perdew, Phys. Rev. B. 33 (1986) 8822.
- [17] C.Pisani, Quantum-mechanical ab-initio calculation of the properties of crystalline materials.Lecture notes in Chemistry, (1996).
- [18] J.C.Slater, Phys Rev, vol. 51.10(1937) 846-851.
- [19] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, Wien2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2.
- [20] B. Winkler, P. Blaha and K. Schwarz, Am. Mineralogist **81**, 545 (1996).
- [21] D. Singh, Phys. Rev, B 43,p 6388 – 6392 (1991).
- [22] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, WIEN97. Technical University, Vienna,(1997).
- [23] P. Blaha and K. Schwarz, Hyperf. Interact. **52**, 153 (1989).
- [24] P. Dufek, P. Blaha and K. Schwarz, Phys. Rev. Lett. **75**, 3545 (1995).
- [25] K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, Phys. Rev. B **42**, 2051 (1990).
- [26] B. Winkler, P. Blaha and K. Schwarz, Am. Mineralogist **81**, 545 (1996).
- [27] B. kohler, P. Ruggerone, S. Wilke, and M. Scheffler, Phys. Rev. lett. **74**, 1387(1995).

III.1 Introduction

Notre étude a porté sur la recherche des propriétés structurales, magnétiques et électroniques des alliages half-Heusler IrMnAl et IrMnGa. Dans ce chapitre nous présenterons les résultats obtenus par l'approximation du gradient généralisé (GGA PBE) et ainsi une interprétation de ces derniers.

III.2 Détails de calculs

III.2.1 Méthode de calculs

Les calculs des propriétés structurales, électroniques et magnétiques sont effectués par le code Wien2K En utilisant la méthode des ondes planes augmentées linearisées [1].

La première étape dans ce genre de calculs consiste à préciser les valeurs des paramètres importants, qui influent sur le temps et la précision du calcul.

● Les rayons de Muffin-tin (R_{mt}), donnés en unités atomiques (*u.a.*). Les valeurs de R_{mt} que nous avons utilisées pour IrMnX (X=Al, Ga) représentent un bon choix pour notre calcul. Ce choix est basé sur deux critères :

- ✓ S'assurer de l'intégration de la majorité des électrons du cœur dans la sphère (Muffin-tin).
- ✓ Eviter le chevauchement des sphères (Muffin-tin).

● Le paramètre de coupure $RK_{max} = R_{mt} * K_{max}$, R_{mt} est le plus petit rayon de la sphère MT et K_{max} la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres.

● Le nombre de points k considéré dans la zone de Brillouin (ZB). Ces derniers conduiront à la détermination des k -points spéciaux dans la 1^{ère} ZB.

III.2.2 Choix des paramètres de calcul

Les composés IrMnAl, IrMnGa cristallisent dans une structure cubique dont le group de symétrie $F-43m$ (216). Pour les alliages étudiés dans ce mémoire, la configuration atomique est la suivante :

- Pour IrMnAl : Ir(0.5,0.5,0.5) ; Mn(0,0,0) ; Al(0.25,0.25,0.25) (Figure.III.5).
- Pour IrMnGa : Ir(0.25,0.25,0.25) ; Mn(0,0,0) ; Ga(0.5,0.5,0.5) (Figure.III.6).

On a utilisé un rayon R_{mt} (le plus petit rayon des sphères muffin-tin.) pour les atomes Al, Ga, Mn et Ir égal à (2 ua) , (2 ua) , (2 ua) et (2.2 ua) .

Les fonctions d'ondes, les densités électroniques et le potentiel sont développées en base d'harmoniques sphériques autour des sites atomiques c'est-à-dire dans les sphères Muffin-tin avec un rayon de coupure $l_{max} = 10$.

Nous notons que les états suivants sont traités comme des états de valence :

Ir: $4F^{14}5d^76s^2$

Mn: $3d^54s^2$

Al: $3s^23p^1$

Ga: $3d^{10}4s^24p^1$

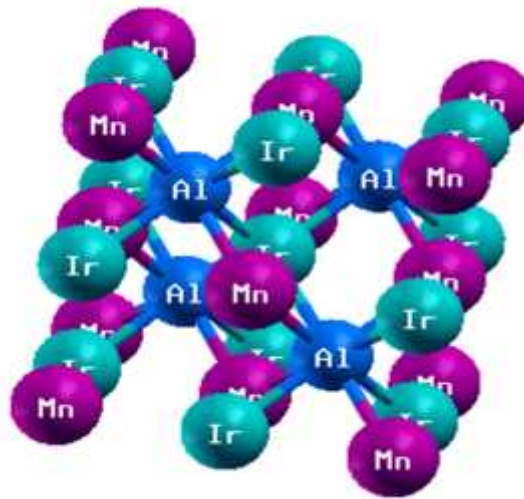


Figure III.1 : Structure cristalline du IrMnAl

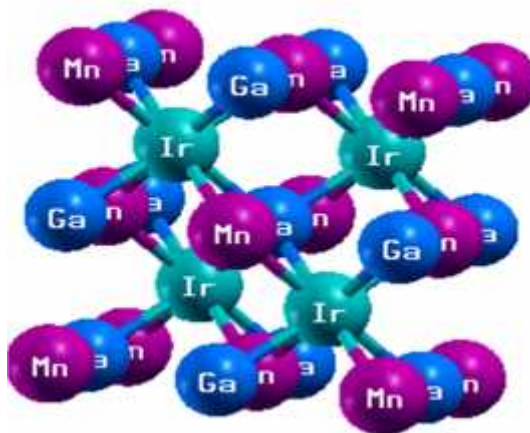


Figure III.2 : Structure cristalline du IrMnGa

III.2.3 Etude de convergence

Pour définir les paramètres de calcul: $R_{mt} * K_{max}$ (R_{mt} est le rayon minimum des sphères muffin-tin et K_{max} le vecteur d'onde de coupure dans l'espace réciproque), et le nombre de points k assurant la convergence de l'énergie totale E_{tot} avec la meilleure précision possible :

On fixe la valeur de nombre de points k à 84 [$X_{Kgen}=2500$] et on a fait varier $R_{mt} * K_{max}$ de 6 à 9.5 avec un pas de 0.5. pour chacune de ces valeurs on calcule l'énergie totale, On a pris les résultats obtenue pour l'énergie totale sont dans les figures données, la variation en fonction du $R_{mt} * K_{max}$, respectivement. Ces courbes montrent que la convergence est atteinte à 8 pour IrMnAl et 8.5 pour IrMnGa.

*Tableau(III.1): convergence de (E_{tot}) en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ pour IrMnAl*

R_{mt} K_{max}	E_{tot}	E/E
6	-38519.02658113	$2,84.10^{-6}$
6.5	-38519.13615674	$1,34.10^{-6}$
7	-38519.18797147	$6,46.10^{-7}$
7.5	-38519.21287269	$3,09.10^{-7}$
8	-38519.22477695	$1,44.10^{-7}$
8.5	-38519.23020340	$9,91.10^{-8}$
9	-38519.23402437	$7,05.10^{-8}$

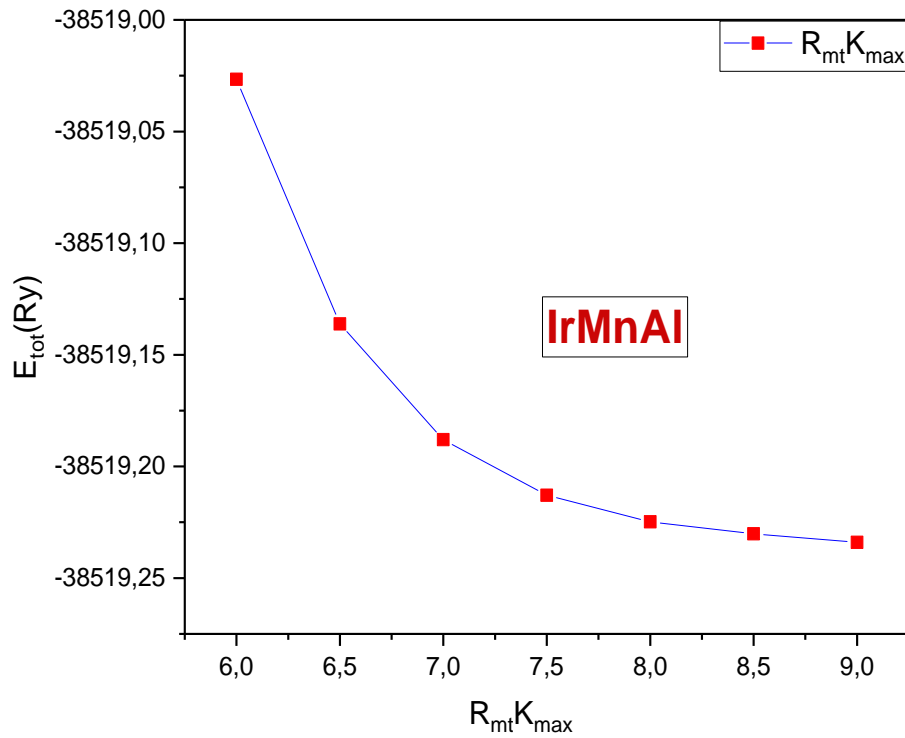


Figure III.3: convergence de E_{tot} en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ pour IrMnAl

Tableau(III.2): convergence de (E_{tot}) en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ pour IrMnGa

$R_{mt} K_{max}$	E_{tot}	E/E
6	-41921.47914616	$4.39 * 10^{-6}$
6.5	-41921.66330702	$2.24 * 10^{-6}$
7	-41921.75747120	$1.08 * 10^{-6}$
7.5	-41921.80281719	$5.45 * 10^{-7}$
8	-41921.82568569	$2.797 * 10^{-7}$
8.5	-41921.83741525	$1.33 * 10^{-7}$
9	-41921.84300648	$6.46 * 10^{-8}$

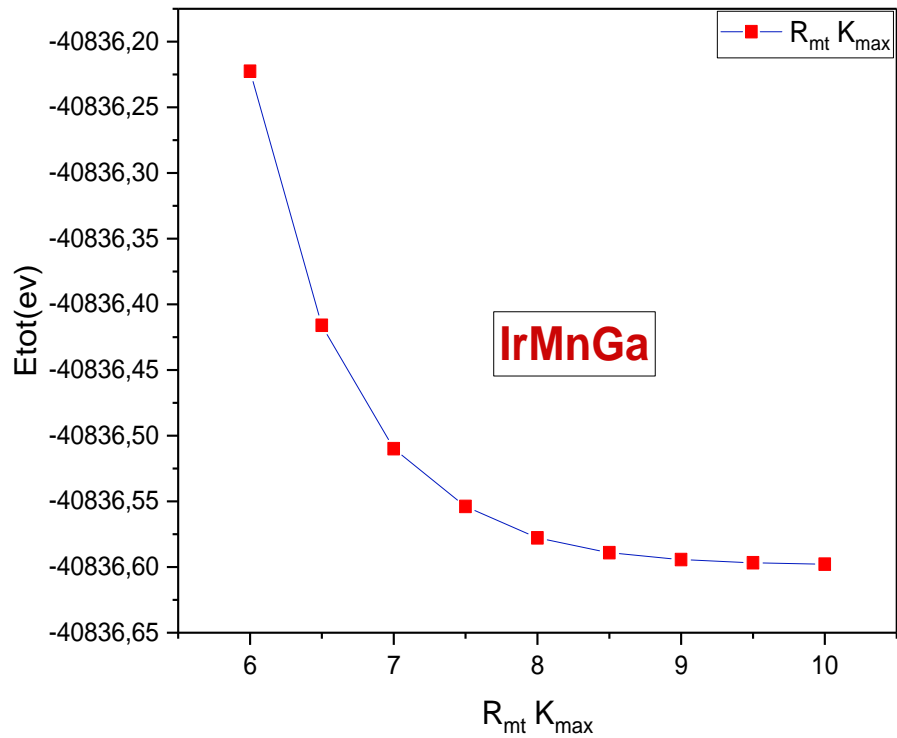
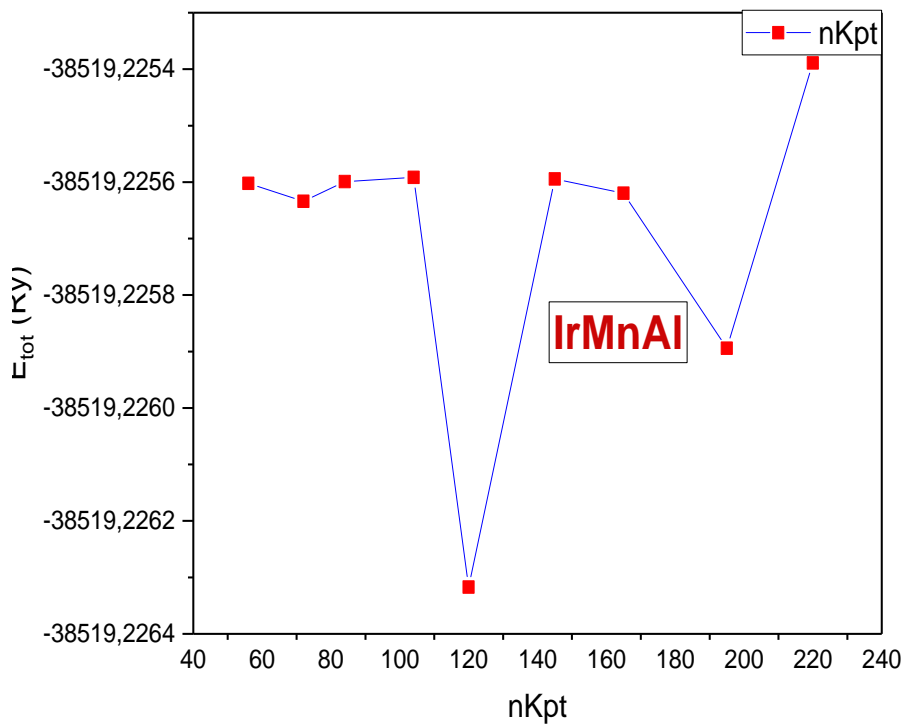


Figure III. 4: convergence de E_{tot} en fonction de $R_{mt} K_{max}$ pour IrMnGa

Après la détermination de la valeur de $R_{mt} K_{max}$, on a fixé ce dernier à (8 pour IrMnAl et 8.5 pour IrMnGa) et on a fait varier le nombre de points k de 1500 à 7000 avec un pas de 500 pour chacune de ces valeurs on calcule l'énergie totale, en fonction des valeurs du nombre de points k , respectivement. Ces courbes montrent que la convergence de IrMnAl est atteinte à $165 [X_{kgen}=5000]$ et $104 [X_{kgen}=3000]$ pour IrMnGa.

Tableau(III.3): convergence de (E_{tot}) en fonction de $nKpt$ pour IrMnAl

$nKpt$	E_{tot}	E/E
56	-38519.22560218	$8,23 \cdot 10^{-10}$
72	-38519.22563391	$-9,01 \cdot 10^{-10}$
84	-38519.22559918	$-7,5 \cdot 10^{-12}$
104	-38519.22559151	$1,88 \cdot 10^{-8}$
120	-38519.22631716	$-1,87 \cdot 10^{-8}$
145	-38519.22559457	$2,95 \cdot 10^{-9}$
165	-38519.22561973	$7,12 \cdot 10^{-9}$
195	-38519.22589428	$-9,12 \cdot 10^{-9}$



FigureIII.5: convergence de(E_{tot}) en fonction de $nKpt$ pour IrMnAl

Tableau(III.4): convergence de(E_{tot}) en fonction de $nKpt$ pour IrMnGa

$nKpt$	E_{tot}	E/E
56	-41921.82564771	$1.76 \cdot 10^{-9}$
72	-41921.82572160	$-3.53 \cdot 10^{-10}$
84	-41921.82570677	$1.84 \cdot 10^{-9}$
104	-41921.82578408	$-2.05 \cdot 10^{-10}$
120	-41921.82577547	$-1.48 \cdot 10^{-9}$
145	-41921.82571337	$3.79 \cdot 10^{-10}$
165	-41921.82572926	$4.12 \cdot 10^{-10}$
195	-41921.82574657	$-6.41 \cdot 10^{-10}$

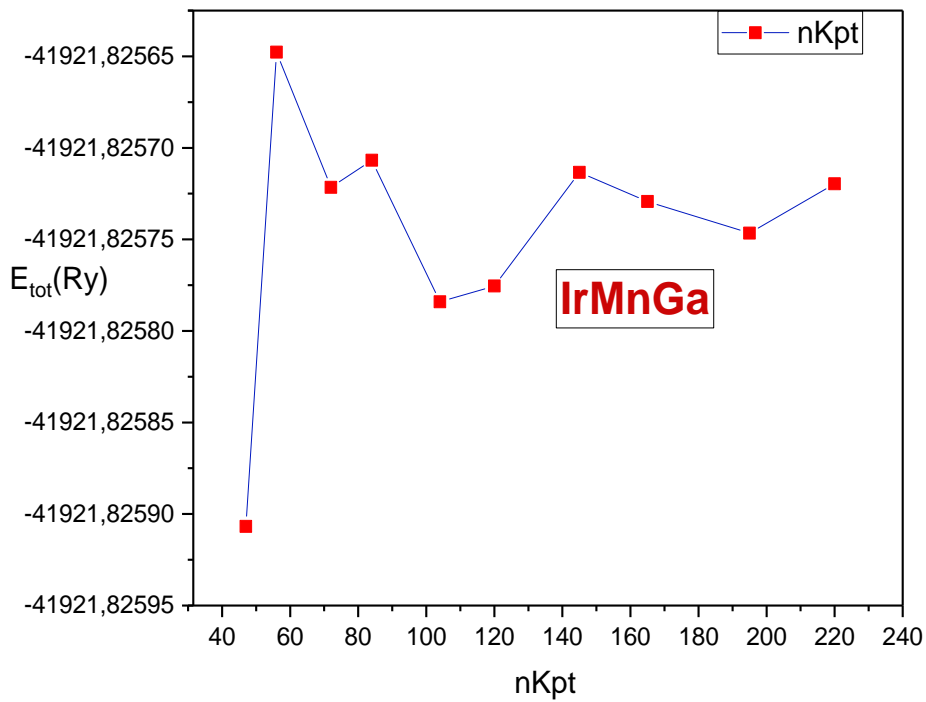


Figure III.6: convergence de(E_{tot}) en fonction de $nKpt$ pour IrMnGa

D'après les testes de convergence, les ondes planes à la région interstitielle sont limité à $RK_{max} = 8$ pour IrMnAl et 8.5 pour IrMnGa et les k points des composés sont IrMnAl (165) et IrMnGa (104).

III.3 Etude des propriétés structurales

L'étape la plus importante dans un calcul ab-initio est la détermination des propriétés structurales du matériau étudié. La connaissance de ces informations nous permet d'accéder par la suite à d'autres propriétés physiques (électroniques, optiques, ...).

Les données structurales a l'équilibre sont obtenues par ajustement de l'énergie totale en fonction du volume (à $T = 0K$) a l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [2, 3].

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

E_0 : L'énergie d'équilibre.

V_0 : est le volume de la maille élémentaire à l'équilibre.

B : Module de compression d'équilibre.

B' : Dérivée du module de compression par rapport à la pression a l'équilibre.

Le module de compression B est déterminé par la relation suivante :

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

L'équation de Murnaghan donne un bon fit de l'énergie en fonction du volume de la maille primitive. Les figures (III.7, III.8) présentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour des composés semi-Heusler de IrMnX (X = Al, Ga) avec spin polarisé et sans spin polarisé.

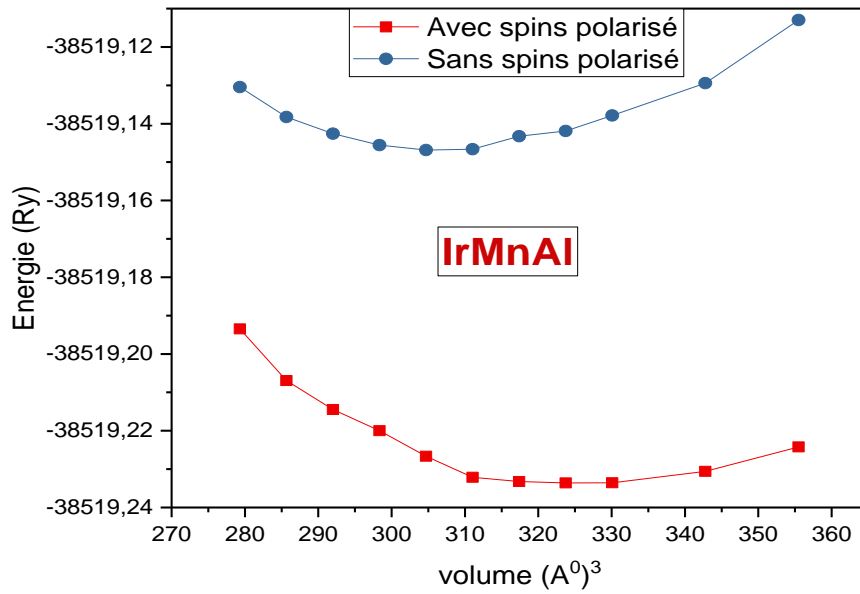


Figure III.7: L'énergie totale en fonction du volume du IrMnAl avec et sans spin polarisé

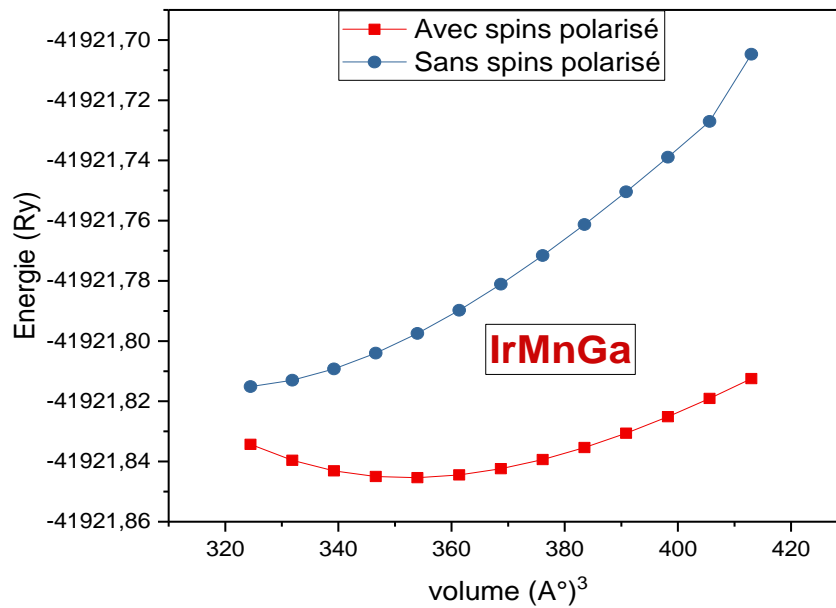


Figure III.8: L'énergie totale en fonction du volume du IrMnGa avec et sans spin polarisé

Pour chaque courbe, nous remarquons que l'énergie présente un minimum pour un volume donné. Ce dernier correspond au paramètre de maille optimisé, qu'est déterminé à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [2, 3]. Ainsi que le module de compression et sa dérivée par rapport à la pression

à l'équilibre. On a dans les deux cas (IrMnAl, IrMnGa) la phase la plus stable correspond à l'état magnétique.

Les paramètres structuraux tels que le paramètre de maille, le module de compressibilité B et sa dérivée B' obtenus lors des calculs sont présentés sur le tableau (III.5).

Tableau (III.5): Paramètre du réseau (Å), Module de compressibilité B (GPa), sa dérivée B'.

Paramètres	IrMnAl		IrMnGa	
	Non-magnétique	magnétique	Non-magnétique	magnétique
a calculé (Å)	5.68	5.78	5.75	5.93
a expérimentale (Å)	/	5.73 [4]	/	6.023[5]
a/a_{exp}		$8,726 \cdot 10^{-3}$		$1,54 \cdot 10^{-2}$
B(GPa)	160.2545	129.1647	192.4641	125.8626
B'	4.2545	4.6267	5.9795	4.9889

On remarque que l'alliage IrMnAl plus résistive a compression par rapport IrMnGa.

III.4 Etude des propriétés magnétique

III.4.1 Moment magnétique

Galanakis et al [6], ont montrés que dans le cas des alliages half-Heusler demi-métallique, le moment magnétique total suit une relation bien définie dite règle de Slater Pauling [7,8] :

$$M_T = N_v - 18 \quad (III.3)$$

Où N_v est le nombre total des électrons de valence,

Tableau (III.6) : les valeurs calculées du moment magnétique total, les moments magnétiques partiels en (μ_B) et la polarisation de spin pour les alliages IrMnX(X=Al,Ga)

Composé	N_v	M_T	M_{Ir}	M_{Mn}	M_X
IrMnAl	19	3.96906	0.34643	3.26324	-0.01347
IrMnGa	19	4.02140	0.14401	3.55350	0.01244

D'après Les valeurs des moments magnétiques obtenus nous remarquons une déviation par rapport à la règle Slater Pauling.

III.5 Etude des propriétés électroniques

III.5.1 Structures de bandes

Les bandes d'énergie donnent les énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes sont donc représentées dans l'espace réciproque, et pour simplifier, seules les directions entre les points de hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées [9]. La Figure III.9 et Figure III.10 représente les structures de bandes électroniques des spins majoritaires et des spins minoritaires, calculées par la *GGA(PBE)*.

Dans ces figures, un chevauchement a été constaté entre les bandes d'énergie de structure et le niveau de fermi E_F . Ce chevauchement confirme que les composés IrMnAl ; IrMnGa sont des métaux. Les courbes de la structure de bande de IrMnAl ; IrMnGa avec spin polarisé (spin "up" et "down") se semblables donc ils ne sont pas des demi métaux.

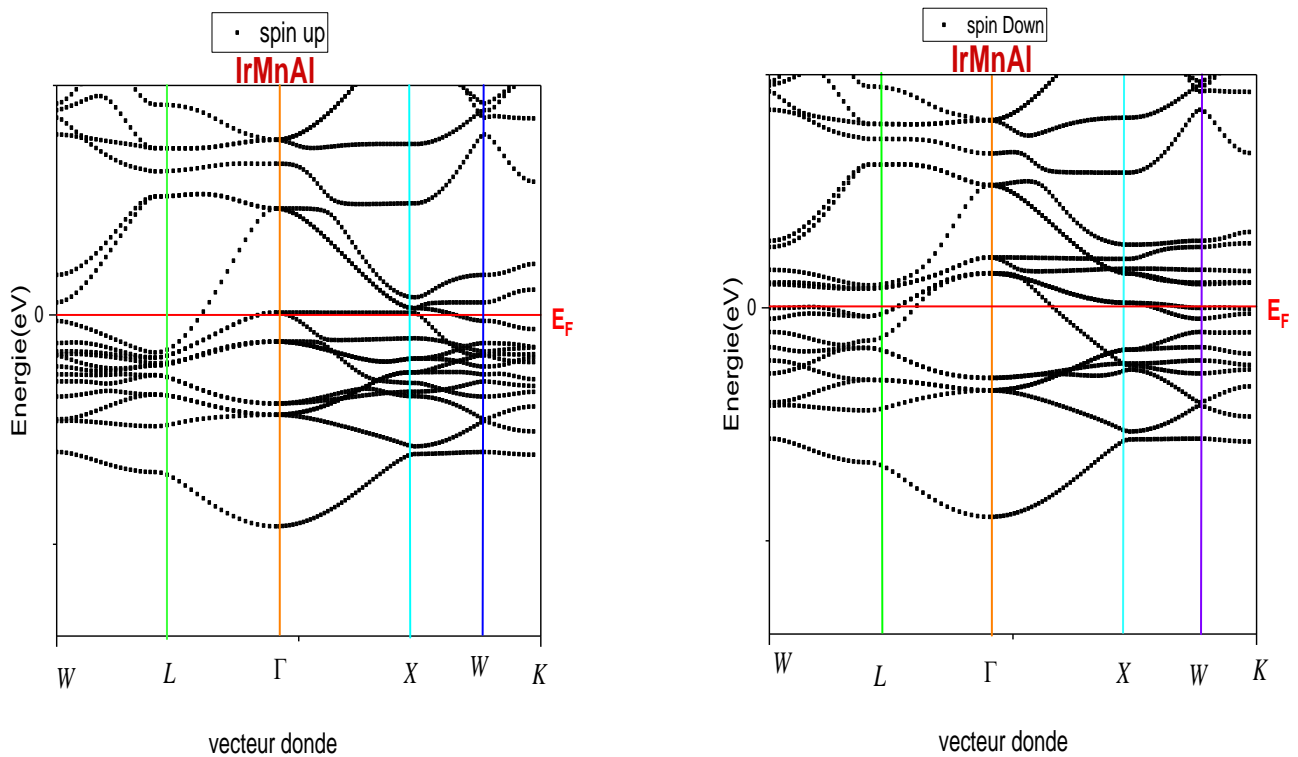


Figure III.9 : La structure de bande de IrMnAl avec spin polarisé "up" () et "down" ().

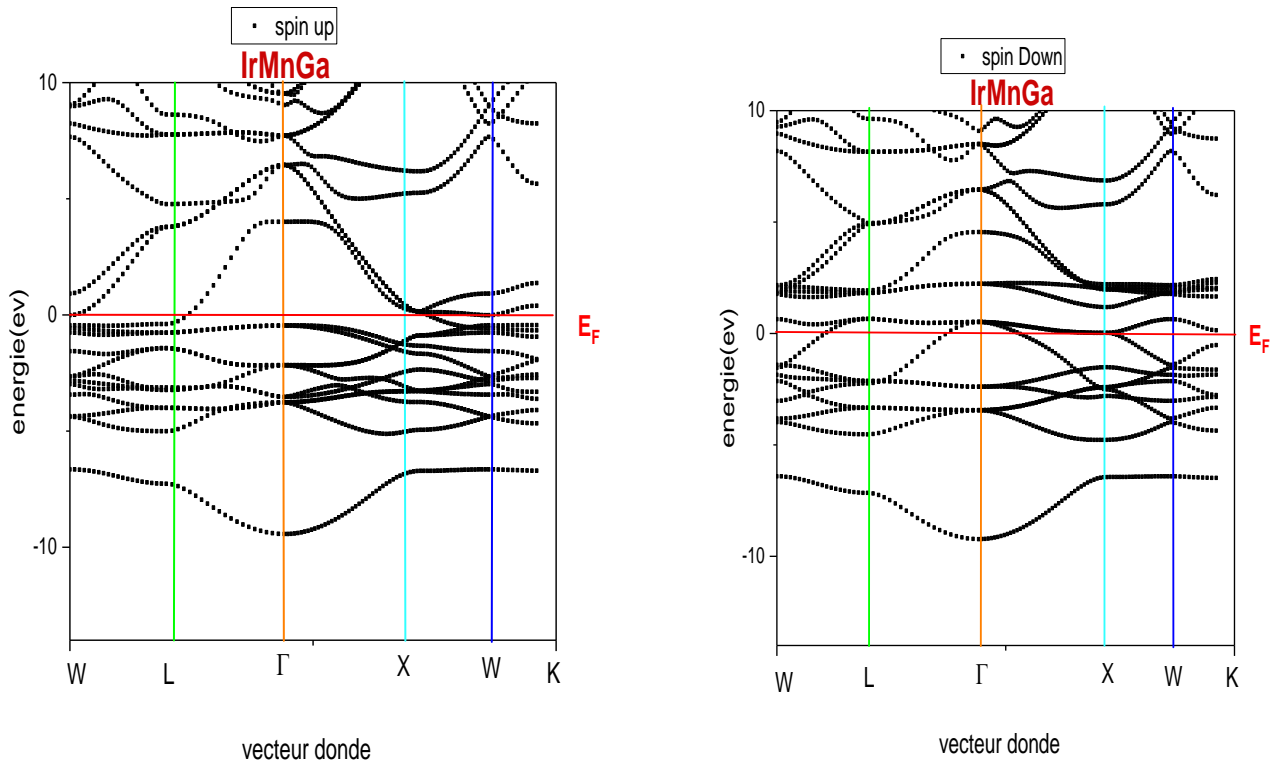
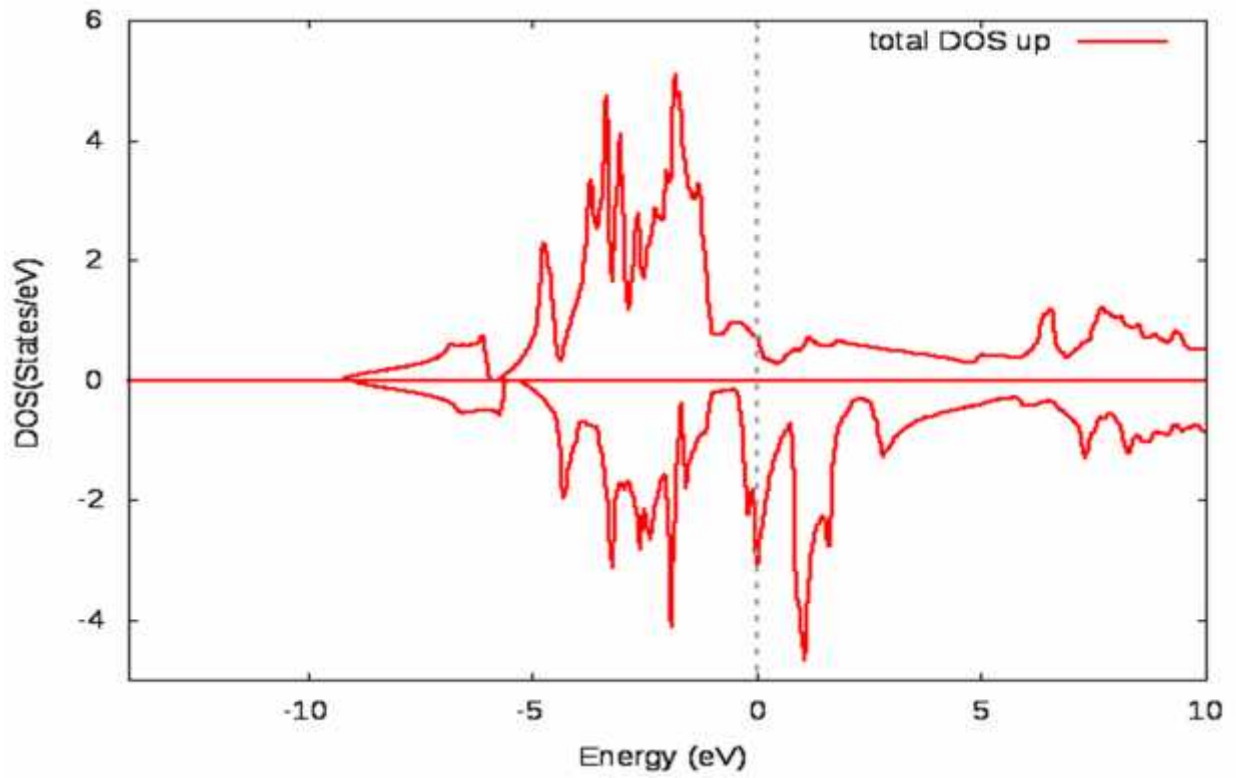


Figure III.10 : La structure de bande de IrMnGa avec spin polarisé "up" () et "down"().

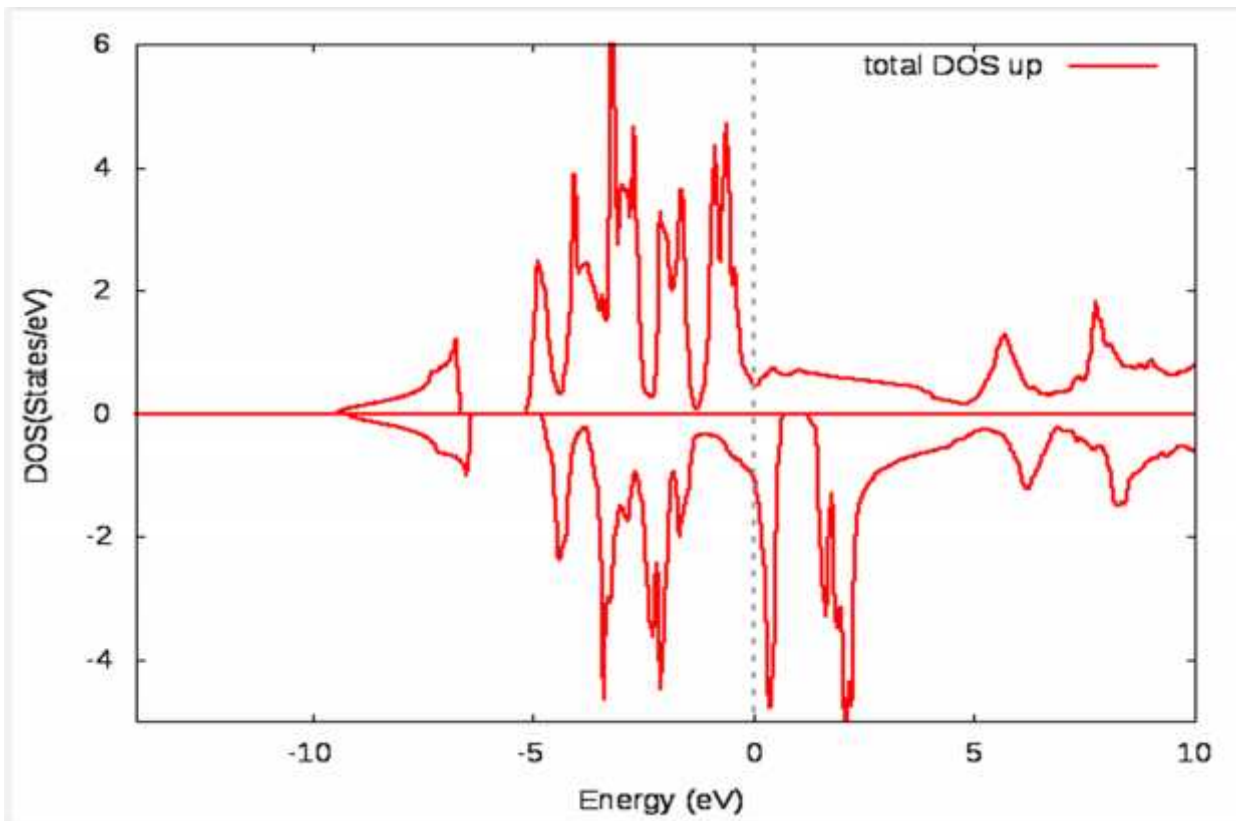
III.5.2 La densité d'états (DOS)

La densité d'états (DOS) est une grandeur physique importante pour comprendre la nature de la structure de bandes électroniques. La plupart des propriétés de transport sont déterminées sur la base de connaissance de la densité d'états. On obtient ainsi les densités d'états partielles qui permettent de déterminer la nature des liaisons chimiques entre les atomes d'un cristal ou d'une molécule. Les projections de la densité d'état totale dépendent des rayons des sphères sur lesquelles sont projetées les densités d'état partielles et ne donnent donc accès qu'à une information qualitative [9].

Les densités d'états (DOS) totales des composés half-Heusler de IrMnX (X=Al et Ga) sont calculées en utilisant l'approximation GGA (PBE). Ils sont illustrés sur les figures (.III.11-III.12), le niveau de fermi est pris comme origine des énergies.



Figures III.11 : La densité d'états totale de IrMnAl



Figures III.12 : La densité d'états totale de IrMnGa

Les Composés IrMnAl, IrMnGa a un caractère magnétique, ceci est dû a l'asymétrie des états de spins "up" () et "down" () comme le montre les figures (III.11, III.12), on note la présence d'un décalage des états de spins "up" () et "down" () dans l'intervalle [-15, 10] eV.

D'après la densité partielle de IrMnAl (voir la figure III.13, figure III.14), on peut observer que l'intervalle de chaque atome dominée par les états (d) comme suit :

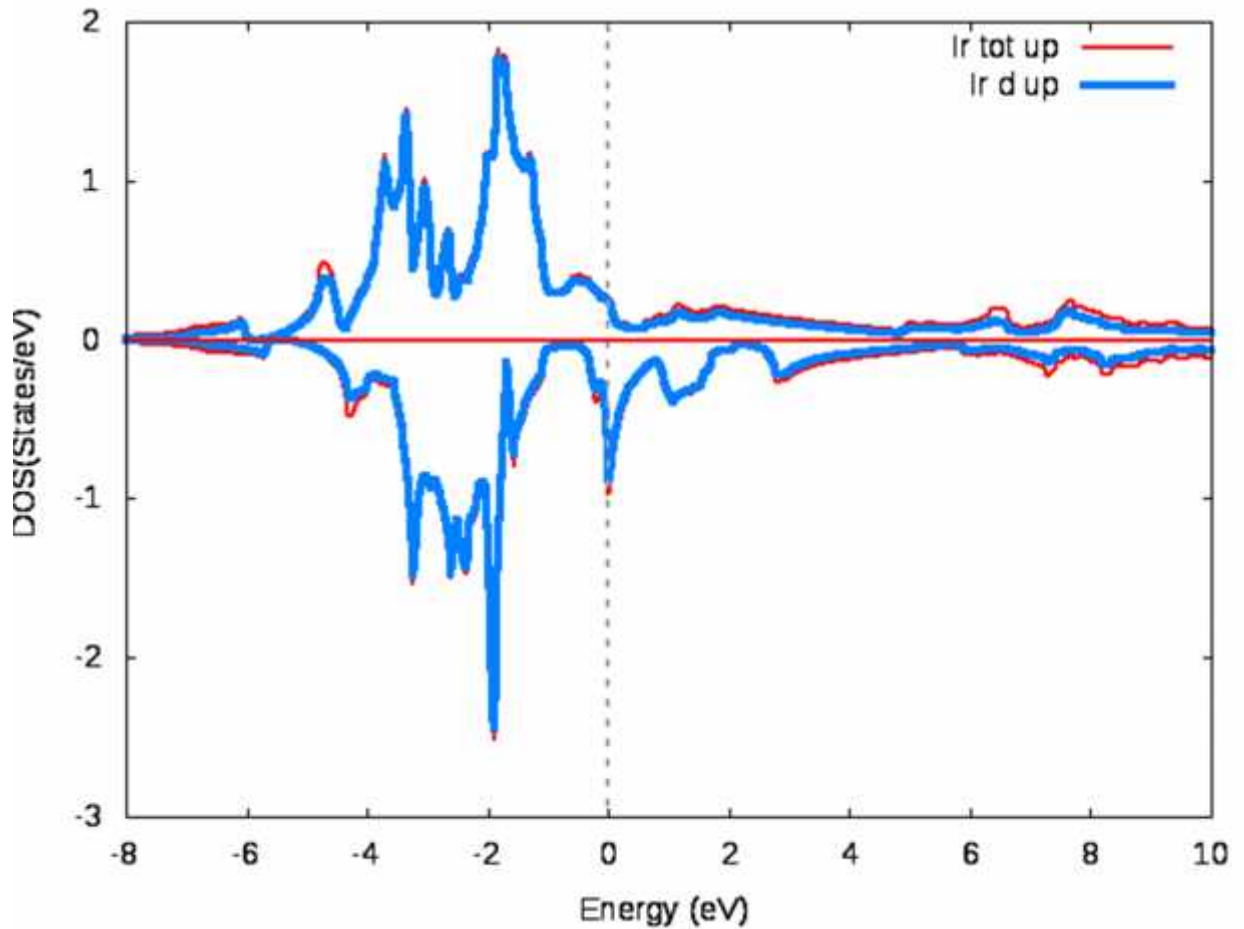


Figure III.13 : La densité d'états partielle (Ir)

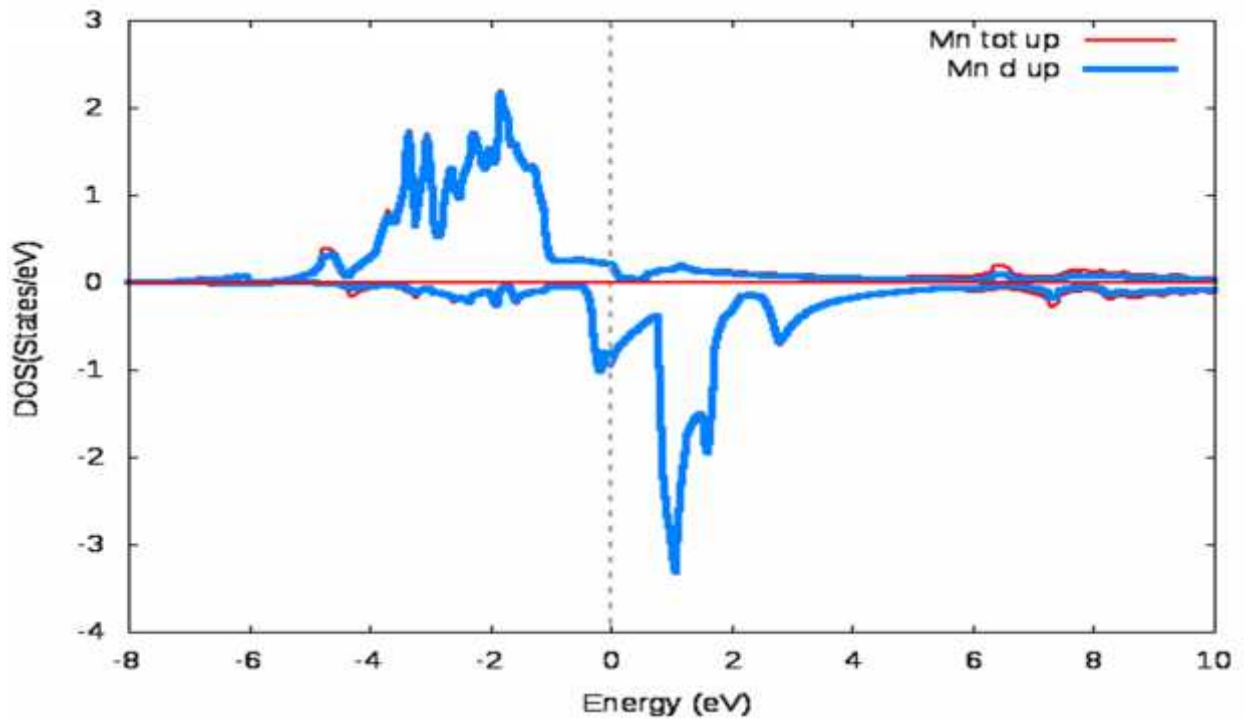


Figure III.14 : La densité d'états partielle (Mn)

la même chose pour (IrMnGa) (voir la figure III.15, figure III.16):

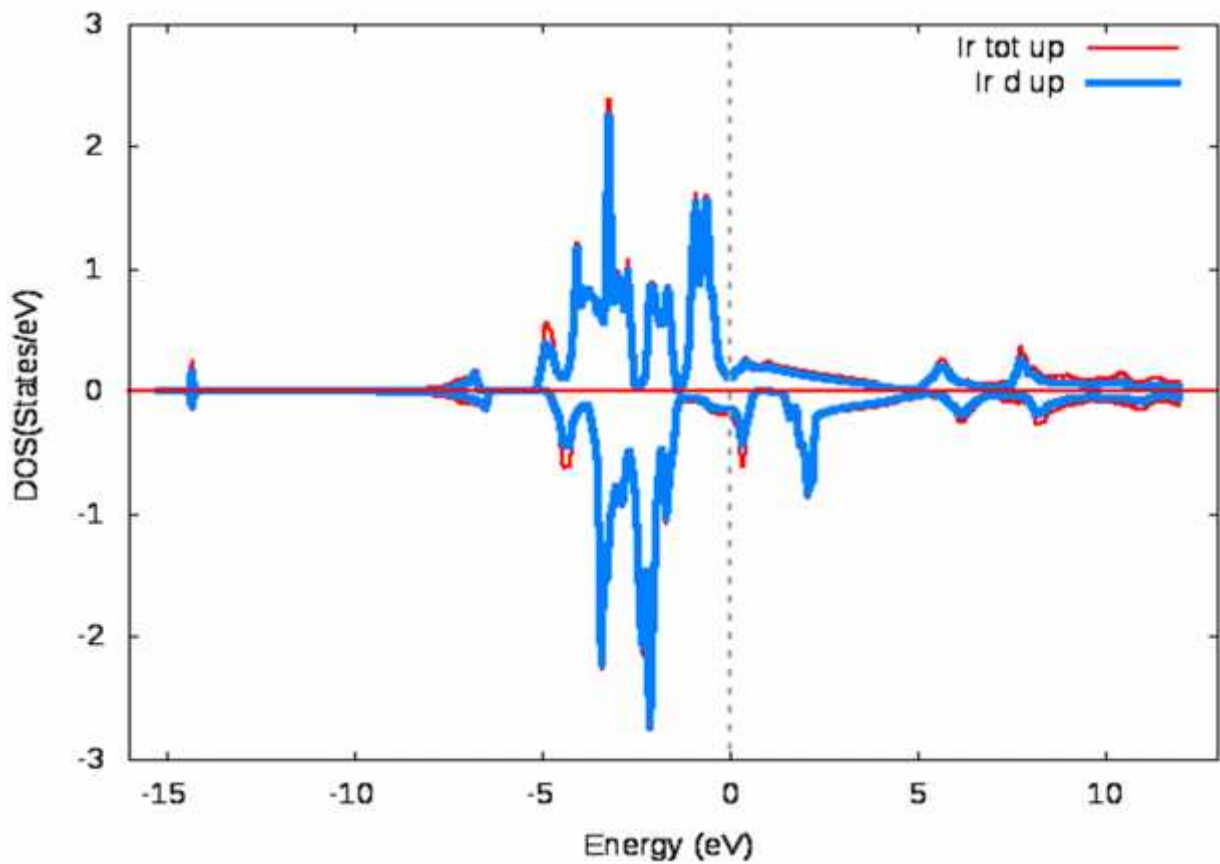


Figure III.15 : La densité d'états partielle (Ir)

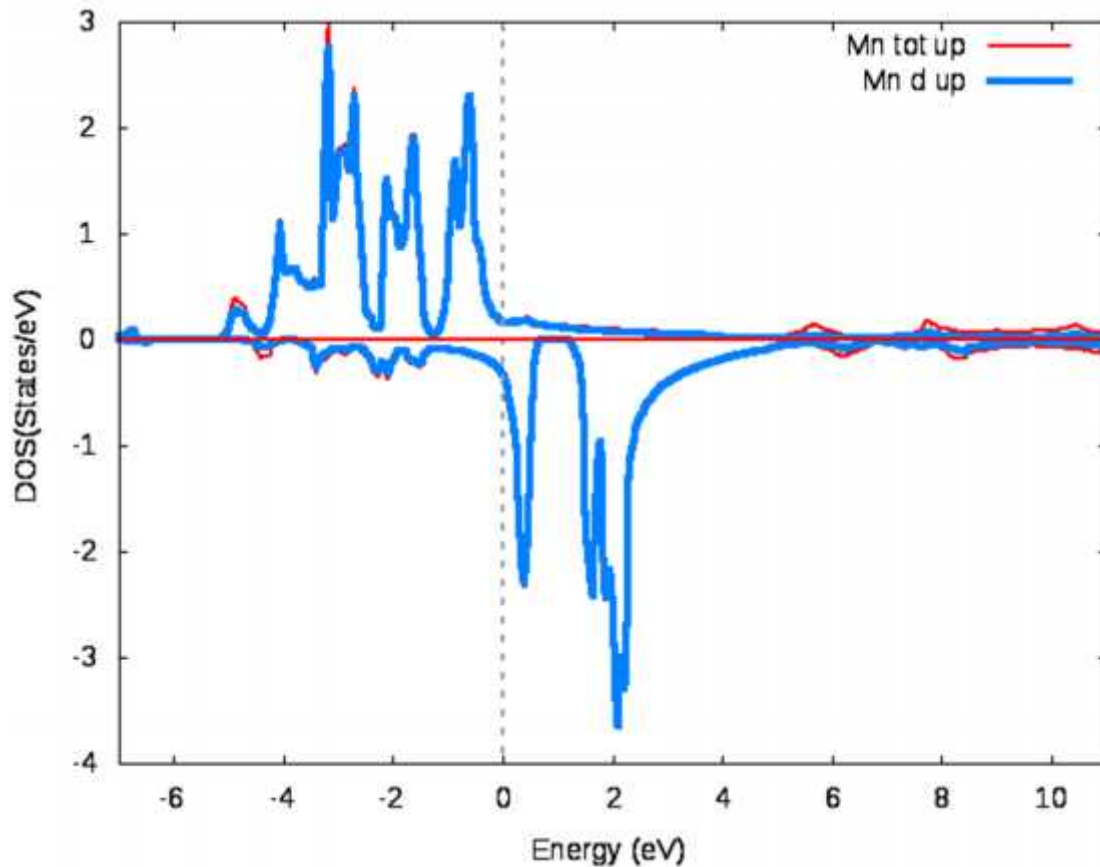


Figure III.16 : La densité d'états partielle (Mn)

D'après ces figures nous remarquons que les diagrammes de la densité des états sont occupés principalement par les états *d* de l'atome *Ir* et l'atome *Mn*. Ainsi il est apparu que la demi-métallicité est détruite par la présence des états *d* de ces atomes. Nous n'avons pas représenté la densité des états partiels des atomes X (Al, Ga) car ils ne participant pas d'une façon significative dans le diagramme de DOS (il n'y a pas de contribution).

À partir du diagramme PDOS de l'atome Al nous notons que la contribution principale des états S apparaissent dans l'intervalle de -10eV jusqu'à -3.5eV et en haut de 5eV avec une faible participation au niveau de Fermi.

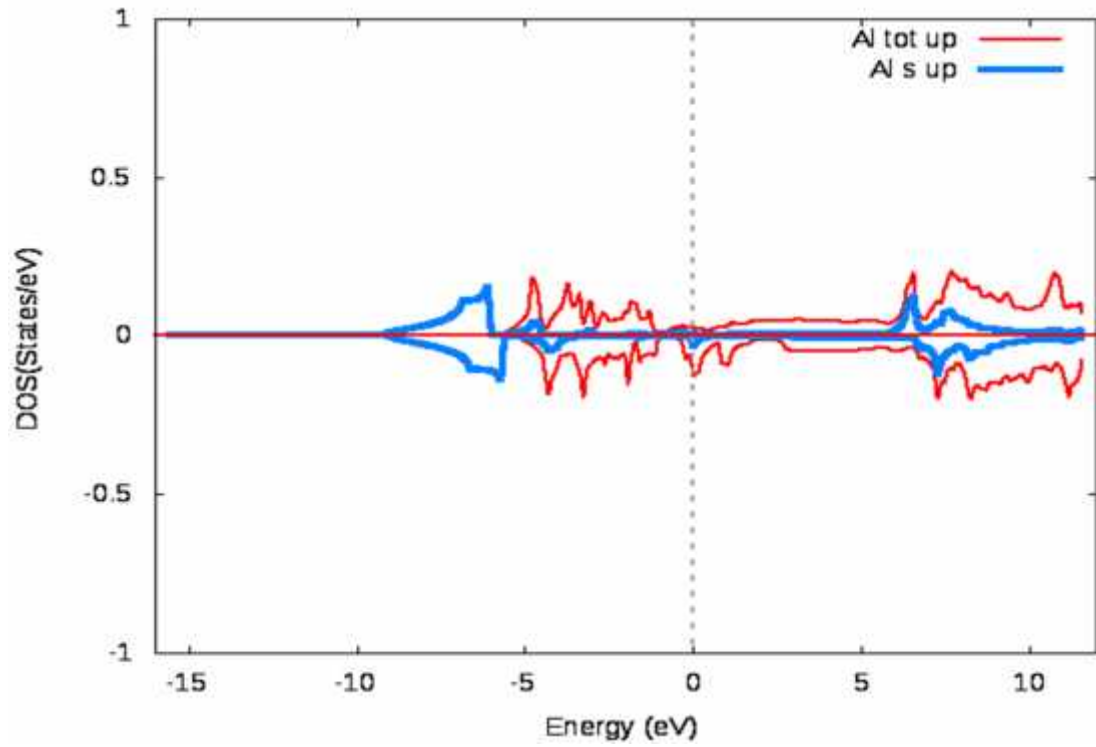


Figure III.17 : La densité d'états partielle S pour (Al)

La participation principale des états P se trouve dans la gamme énergétique de -6eV a-1eV avec une faible participation au niveau de fermi.

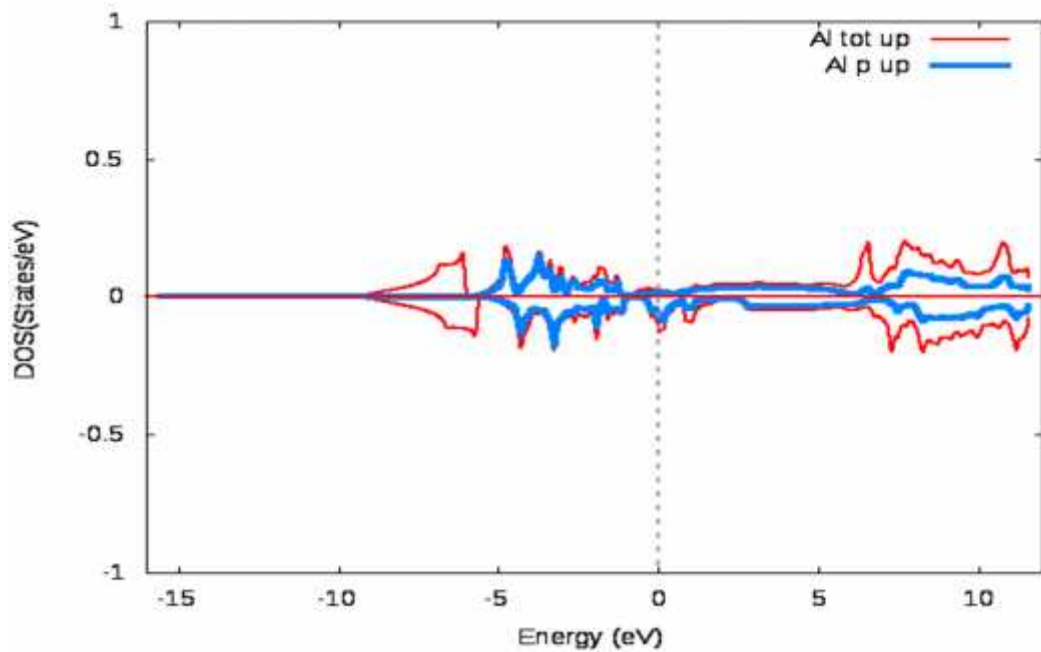


Figure III.18 : La densité d'états partielle P pour (Al)

À partir du diagramme PDOS de l'atome Ga nous notons que la contribution principale des états S apparaissent dans l'intervalle de -9eV jusqu'à -6eV et en haut de 5eV avec une faible participation au niveau de Fermi.

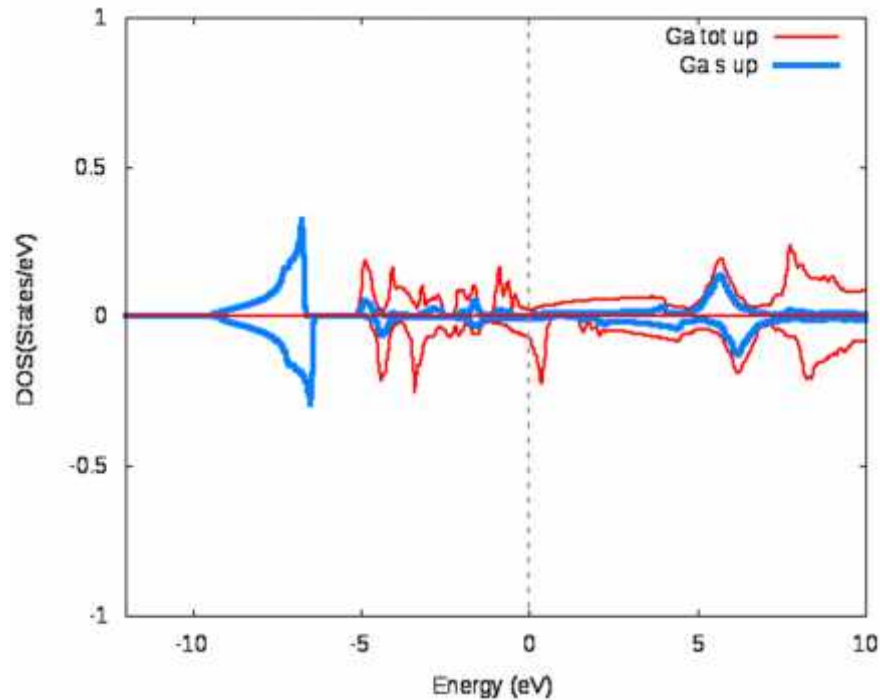


Figure III.19 : La densité d'états partielle P pour (Ga)

La participation principale des états P se trouve dans la gamme énergétique de -5eV à 1eV avec une faible participation au niveau de Fermi.

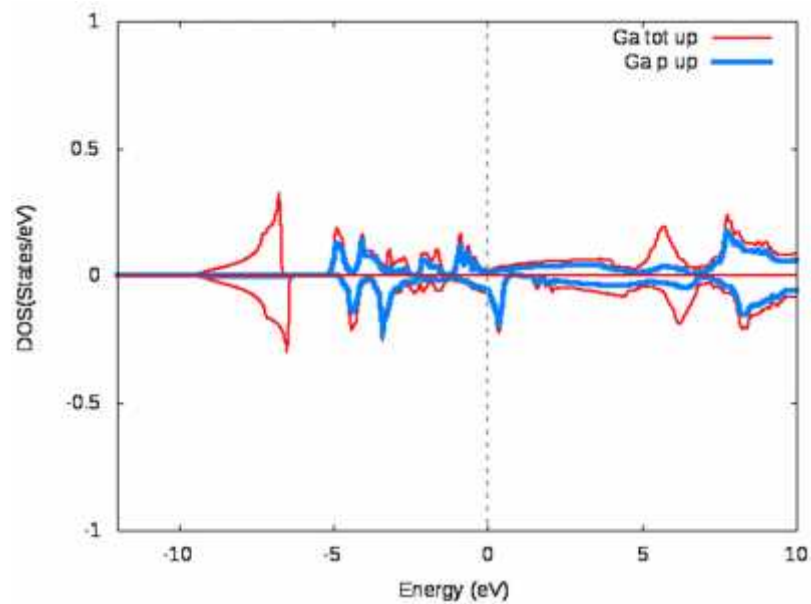


Figure III.20 : La densité d'états partielle P (Ga)

III.6 Conclusion

L'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques des composés Half-Heusler de IrMnX (X=Al, Ga) sévère indispensable pour la compréhension de la relations qui existent entre les structures (la façon dont s'organisent les éléments constituant un matériau) et les propriétés des matériaux. Dans notre étude, nous avons appliqué le code de calcul ab initio WIEN2k basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), on a utilisé la méthode de (FP-LAPW).

Les principaux résultats obtenus sont :

- 1- les propriétés structurales montrent que les valeurs de paramètre de maille optimisées dans l'état FM sont en bon accord avec les données expérimentales.
- 2- La phase la plus stable pour les deux composés IrMnAl, IrMnGa est à l'état magnétique.
- 3- les propriétés magnétiques:

Les alliages IrMnAl, IrMnGa présente une déviation par rapport à la règle de Slater Pauling.

- 4- les propriétés électroniques :

Nos calculs de la propriété électronique (structure de bande et Dos) montrent que:

- ✓ IrMnAl et un métal
- ✓ IrMnGa et un métal

Référence

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave + local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz,
- [2] F. D. Murnaghan ; Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 244 (1944).
- [3] V.G. Tyuterev et N. Vast ; Comp. Mat. Sc. Vol. 38 350 (2006).
- [4] Masumoto, H.; Watanabe, K, New compounds of the C1(b), C1 types of RhMnSb, IrMnSn and IrMnAl, new L2(1) (Heusler) type of Ir₂MnAl and Rh₂MnAl alloys, and magnetic Properties, Journal of the Physical Society of Japan (1972), 32, 281-281.
- [5] Helmholdt, R.B.; de Groot, R.A.; Mueller, F.M.; van Engen, P.G.; Buschow, K.H.J, Magnetic and crystallographic properties of several C1b type Heusler Compounds, Journal of Magnetism and Magnetic Materials (1984), 43, 249-255 .
- [6]] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50, (1983), 2024.
- [7] J.C. Slater, Phys. Rev. 49, 931–93(1936).
- [8] L. Pauling, Phys. Rev. 54, 899–904 (1938).
- [9] Z. ABOUB, Etude *ab-initio* des propriétés structurales et électroniques des systèmes (Sr,La)(Ti,Ni)O₃, mémoire de magister, UNIVERSITE KASDI MERBAH – OUARGLA, 2012.

Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous avons présenté une étude dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) basé sur la méthode des ondes planes augmentées linearisées à potentiel total (FPLAPW), pour prédire les propriétés structurales, magnétiques, électroniques pour les alliages half-Heusler IrMnX (X=Al,Ga) .

La première partie présente une description des notions de base de la spintronique et les difficultés endurées dans ce nouveau domaine de l'électronique. Nous avons discuté quelques solutions proposées pour améliorer l'efficacité des dispositifs électriques utilisant le spin des électrons dans la quantification des phénomènes du transport électrique. Parmi ces solutions est l'insertion des matériaux magnétiques, à titre d'exemple, les semi-conducteurs magnétiques dilués, les pérovskites et les alliages Heusler. Ces matériaux sont les plus prometteurs pour les applications de la spintronique.

Les calculs ab-initio permettent aujourd'hui d'explorer les différentes propriétés de la matière, comme les propriétés structurale, électroniques, élastiques....la deuxième partie argue les différents aspects de la théorie de l'état fondamental, sur lesquels reposent toutes les méthodes ab-initio et particulièrement la DFT.

Finalement, le troisième chapitre présente les résultats obtenus et la discussion. Les principales conclusions extraites de cette partie peuvent être résumés dans les points qui suivent :

- L'optimisation structurale montre que les alliages étudiés sont plus stables dans la phase ferromagnétique que la phase non magnétique.
- Les propriétés structurales montrent que les valeurs du paramètre de maille optimisées dans l'état FM sont en bon accord avec les données expérimentales.
- Le moment magnétique total des alliages IrMnAl, IrMnGa présente une déviation par rapport à la règle de Slater Pauling.
- Le calcul de la structure de bande confirme que les alliages IrMnAl et IrMnGA ne présente pas la demi-métallicité, alors selon cette étude ces matériaux ne se sont pas appropriés aux applications de la spintronique.

RÉSUMÉ

Dans ce travail, nous avons utilisé la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) basé sur la méthode des ondes planes augmentées linearisées à potentiel total (FP-LAPW), implémenté dans le code WIEN2k, pour prédire les propriétés structurales, magnétiques et électroniques des alliages Half-Heusler IrMnX (X=Al, Ga).

Nous avons trouvé que les composés étudiés sont plus stables dans la phase ferromagnétique. Les moments magnétiques de spin ne s'accordent pas avec la règle de Slater-Pauling, Les calculs de la structure électronique par GGA(PBE), prédisent que les alliages IrMnAl, IrMnGa ont un comportement métallique.

Mots clés : Half-Heusler, DFT, FP-LAPW.

ABSTRACT

In this work, we have used the density functional theory (DFT) based on full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method, implemented in WIEN2k, to predict the structural, magnetic and electronic properties of the Half-Heusler alloys IrMnX(X=Al,Ga).

We have found that, the studied compounds are more stable in the ferromagnetic order. The calculated spin magnetic moments are note agreement well with Slater-Pauling rule. The GGA(PBE) calculations of electronic structure predict that IrMnAl,IrMnGa alloys have a metallic behavior.

Keywords: Half-Heusler, DFT, FP-LAPW.

في هذا العمل استعملنا نظرية تابع الكثافة (DFT), معتمدين على طريقة (FP-LAPW) wien2k بالخصائص البنوية, المغناطيسية والالكترونية لانصاف سبائك هسلر IrMnX(X=Al,Ga), هي اكثر استقرارا في الطور الفيرومغناطيسي, العزم المغناطيسي السبيني لا يتفق مع قاعدة سلاتر -بولينغ.

حسابات البنية الالكترونية عن طريق GGA(PBE) IrMnAl ,IrMnGa .

الكلمات المفتاحية : هسلر, نظرية كثافة الدالية DFT, الامواج المستوية المتزايدة خطيا FP-LAPW.

C HAPITRE I
ETAT DE
L'ART

C

HAPITRE II

APERÇU SUR LES
MÉTHODES DE
CALCUL

C

HAPITRE III
RESULTAS ET
DISCUSSIONS

I

INTRODUCTION

GÉNÉRALE

C ONCLUSION GÉNÉRALE