

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة عمار تليجي الأغواط

UNIVERSITE AMAR TELIDJI, LAGHOUAT



كلية العلوم

Faculté des Sciences

قسم: علوم المادة

Département : Science de la Matière

MEMOIRE DE MASTER

Domaine: *Sciences de la Matière*
Filière : *Physique des Matériaux*
Option : *Physique des Matériaux*

Présenté par
Mlle. MATALLAHAsma

THEME

**Calcul ab-initio des propriétés physique des quelques alliages
Half-Heusler**

Soutenu Publiquement devant la commission d'examen composée de:

| | | |
|-----------------------|-----|-----------|
| Mr. GUIBADJ Abdenacer | MCA | Président |
| Mr. LAGOUN Brahim | MCB | Examineur |
| Mr .KHENCHOUL Salah | MAA | Encadreur |

Promotion 2015/2016

Remerciement

Je remercie mon dieu ALLAH qui est toujours présent avec moi dans le meilleur et dans le pire.

J'exprime toute ma gratitude et ma profonde reconnaissance à mon encadreur

Mr. KHENCHOUL Salah qui m'ont dirigé et encadré durant mon travail ainsi que de m'avoir proposé un sujet aussi passionnant qu'intéressant. Leurs disponibilités permanentes, leurs aides et leurs compétences m'ont été d'un grand secours et soutien.

Je tiens aussi à remercier l'ensemble des membres du jury. J'adresse toute ma

reconnaissance à Mr. MIBADI Abdenacer à l'Université de Laghouat, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire et Je tiens aussi à remercier Mr. LAGOUN Brahim Examineur le jury de ce mémoire.

Mes plus sincères remerciements vont également à tous mes enseignants du Département du science de matière (SM), qui ont fortement enrichit ma formation.

Dédicace

Les plus chères personnes dans la vie : Mon père
Mohammed Habib ma mère K Hadidja et.

A mon frère, Toufik Abdelhak surtout
lui fille K Hadidja (Minousa), Abdel
Moumen Charafeddine.

A Mes sœurs : Djemilla surtout lui
garçon Touta, Zineb, Manal, Hafidha, Nardjes
Sakina.

A Uncle Said et Tante Nacira et
Abab, Soumia, Sayah, Omar.

A mon en fiancé Morad et ma famille.

A toute ma famille.

A tous mes amis.

(Naima, Fatima Bouchra, Fatima ;
Faiza, K Hadidja, Zahra, Aicha, Iman, Roukia,..)

Je dédie ce travail

Asmaa

Sommaire

Chapitre I: Cadre théorique

| | |
|--|----|
| Introduction générale..... | |
| I.1.Introduction..... | 4 |
| I.2. Théorie de la fonctionnelle de densité(DFT)..... | 4 |
| I.2.1.Théorème de Hohenberg et Kohn..... | 5 |
| I.2.2.Equation de Kohn-Sham..... | 5 |
| I.2.3. L'énergie d'échange et corrélation..... | 6 |
| I.2.4.Solution de l'équation de Kohn-Sham..... | 6 |
| I.2.5.Les systèmes à spins polarisés..... | 7 |
| I.3.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FPLAPW)..... | 9 |
| I.3.1.Méthode des ondes planes augmentées (APW)..... | 9 |
| I.3.2.Méthode linéaire des ondes planes augmentées et linéarisée (LAPW)..... | 10 |
| I.3.3.Approximation de la Densité Locale (LDA)..... | 12 |
| I.3.4.Approximation du Gradient Généralisé (GGA)..... | 12 |
| I.3.5.MODELE DE HUBBARD..... | 12 |
| I.3.5.1.Obtention du modèle de Hubbard..... | 13 |
| I.3.5.2.Pertinence du modèle de Hubbard..... | 13 |
| I.3.5.3.Cas particuliers..... | 14 |
| I.4.Le code WIEN2K..... | 15 |
| Références..... | 17 |

Chapitre II: Généralités sur les alliages Heusler

| | |
|---------------------------|----|
| II.1. Introduction..... | 19 |
| II.2.La spintronique..... | 20 |

Sommaire

| | |
|---|----|
| II.3. Nomenclature des alliages Heusler | 21 |
| II.3.1. Alliages demi-Heusler | 21 |
| II.3.2. Alliage full-Heusler | 21 |
| II.4. structure cristalline..... | 22 |
| II.5. Le magnétisme et alliages Heusler..... | 23 |
| II.5.1. Composés semi-Heusler..... | 24 |
| II.5.2. Composés Heusler..... | 25 |
| Références..... | 27 |

Chapitre III: Résultats et discussion

| | |
|---|----|
| III.1. Introduction..... | 30 |
| III.2. Détails de calcul et discussions..... | 30 |
| III.2.1. l'étude de convergence..... | 30 |
| III.2.2. Optimisation structural..... | 35 |
| III.2.3.1. moments magnétiques et propriétés électroniques..... | 37 |
| III.2.3.2. Les propriétés élastiques à une pression nulle..... | 43 |
| Références..... | 48 |
| Conclusion générale..... | 50 |

Liste des figures

| | |
|---|----|
| Figure I.1 : Diagramme pour la $n^{ième}$ itération du traitement auto-cohérent (self consistent) pour résoudre les équations de Hartree-Fock ou de Kohn-Sham [1]..... | 8 |
| Figure I.2: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques: sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β , respectivement..... | 9 |
| Figure I .3: Structure du programme WIEN2k..... | 16 |
| Figure II.1 : Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs..... | 19 |
| Figure II.2 : Schémas représentatifs des mailles cubiques d'un Full-Heusler (gauche) et d'un Half-Heusler (droite)..... | 23 |
| Figure II.3 : (a) Composés semi-Heusler XYZ qui montrent un seul sous-réseau magnétique puisque seuls les atomes sur les sites octaédriques portent un moment magnétique localisé. (b) composés Heusler X ₂ YZ qui ont deux sous-réseaux magnétiques pouvant se coupler ferromagnétiquement ou antiferromagnétiquement... | 25 |
| Figure II.4: Structure Heusler inverse CuHg ₂ Ti (a), structure quaternaire LiMgPdSn(b)..... | 26 |
| Figure III.1: l'étude de convergence du matériau FeTiSb..... | 31 |
| Figure III.2: l'étude de convergence du matériau FeVSb..... | 33 |
| Figure III.3: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre LDA..... | 36 |
| Figure III.4: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre GGA..... | 36 |
| Figure III.5: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre LDA+U..... | 37 |

Liste des figures

| | |
|---|----|
| Figure III. 6 : structure des bandes FeTiSb (up et down) par le cadre GGA..... | 39 |
| Figure III. 7 : structure des bandes FeVSb (up et down) par le cadre GGA..... | 39 |
| Figure III. 8 : structure des bandes FeTiSb (up et down) par le cadre LDA+U..... | 40 |
| Figure III.9: structure des bandes FeVSb (up et down) par le cadre LDA..... | 40 |
| Figure.III.10: d'états totales (TDOS) par le cadre LDA+U et GGA De composé FeTiSb.. | 41 |
| Figure III.11 : Densité d'états totales (TDOS) par le cadre LDA+U et GGA De composé FeVSb..... | 41 |
| Figure III.12 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Fe) par le cadre LDA+U..... | 42 |
| Figure III.13 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Ti) par le cadre LDA+U De composé FeTiSb..... | 42 |
| Figure III.14 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Ti) par le cadre LDA+U De composé FeVSb..... | 43 |

Liste des tableaux

| | |
|---|----|
| Tableau II.1 : Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$ | 22 |
| Tableau III.1: présenté les variations de les énergies E en fonction de RK_{max} | 31 |
| Tableau III.2: présenté les variations de les énergies E en fonction de $nkpt$ | 32 |
| Tableau III.3: présenté les variations de les énergies E en fonction de G_{max} | 32 |
| Tableau III.4: présenté les variationde les énergies E en fonction de RK_{max} | 33 |
| Tableau III.5: présenté les variations de les énergies E en fonction de $nkpt$ | 34 |
| Tableau III.6: présenté les variations de les énergies E en fonction de G_{max} | 34 |
| Tableaux III.7 : Les paramètres de maille optimisés en (Å)..... | 37 |
| Tableau III.8: Total et moments magnétiques partiels dans (μB) par cellule d'unité..... | 38 |
| Tableau III.9: les constants élastiques (GPA), module de cisaillement (le GPA) et le facteur anisotrope d'Alliages de FeTiSb et FeVSb | 44 |
| Tableau III.10: Les valeurs obtenues des vitesses de propagation des ondes (m/s)..... | 45 |
| Tableau III.11: Le module de compressibilité B (GPA), les modules (G_V, G_R et G_H)(GPA), le module d'Young E (GPA), le facteur anisotrope A_G , le coefficient de poissons et le rapport B/G_H | 46 |
| Tableau III.12: V Longitudinal calculé (m/s), v transversale (m/s), atteint en moyenne des vitesse de vague élastiques v (m/s) et Debye Température θ_D (k)..... | 47 |

Introduction Générale

Introduction Générale

Introduction Générale:

L'étude des matériaux solides à l'échelle atomique commence souvent par un cristal idéal au zéro absolu pour lequel on calcule la structure électronique au moyen de la théorie de la fonctionnelle de densité (Density Functional Theory ou DFT). Ceci permet d'effectuer un traitement à l'aide de la mécanique quantique de la physique, derrière des caractéristiques telles que la stabilité, le comportement chimique, la relaxation des atomes, les transitions de phases, les propriétés électriques, mécaniques, optiques, magnétiques, etc. Pour la solution des équations de la DFT, plusieurs méthodes ont été développées.

La méthode linéaire des ondes planes augmentées (Linearized Augmented Plane Waves ou LAPW) est l'une des méthodes les plus performantes. Elle est incorporée dans le code du WIEN2k qui est employé aujourd'hui dans le monde entier par plus de groupes de chercheurs pour étudier les propriétés cristallines à l'échelle atomique (le site internet de ce logiciel est : www.wien2k.at).

L'électronique a connu un développement immense pendant les trois dernières décennies, mais peu d'attention a été dédiée à l'incorporation de matériaux magnétiques dans les dispositifs électroniques intégrés. Toutefois, un nouveau champ en électronique, la spintronique, a largement attiré l'attention récemment. Le fondement étant la vérité de base qu'un électron a un spin en plus de sa charge.

Dans le contexte de l'électronique de spin, les spins des électrons et pas uniquement leur charge électrique, sont contrôlés dans l'opération de transfert d'information dans les circuits.

De nos jours, des calculs de ce genre peuvent être effectués sur des ordinateurs suffisamment puissants pour des systèmes contenant environ 100 atomes par cellule unitaire[1]. Il est basé sur la méthode du potentiel complet à ondes planes augmentées (et linéaires) + la méthode d'orbitales locales (full-potential (linearised) augmented plane-waves + local orbitals method ou FP-(L) APW + lo), qui est parmi les techniques les plus précises pour des calculs de structure électronique. Dans la DFT, l'approximation de densité locale de spin (Local Spin Density Approximation ou LSDA), l'approximation de densité de spin avec le potentiel de coulomb (LSDA+U), ou, plus récemment, l'approximation de gradient généralisé (Generalized Gradient Approximation ou GGA) sont employées pour traiter les termes d'échange et de corrélation. WIEN2k effectue des calculs tout-électron et prend en considération les effets relativistes parmi d'autres.

Introduction Générale

D'où l'intérêt de ce travail de ce mémoire qui a consisté à étudier les propriétés électroniques et magnétiques des alliages Heusler qui sont des alliages ferromagnétiques.

Ces caractéristiques permettent d'utiliser ces alliages dans des gammes de fréquences plus élevées que les matériaux ferrimagnétiques et la température de Curie élevée les rend plus stables en température.

Ce mémoire est organisé comme suit:

Dans ce travail, nous nous intéressons à une famille d'alliages Heusler à base des matériaux FeTiSb et FeVSb c'est des alliages half Heusler.

Le premier chapitre nous avons donné des informations générales sur des alliages Heusler

Au chapitre deux, les méthodes de simulation qui seront utilisées sont décrites. Celles-ci reposent sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) qui a permis de développer plusieurs méthodes de calcul (LAPW) ayant eu plus ou moins de succès en reproduisant ou en prédisant les propriétés recherchées.

Et le code de simulation WIEN2k est exposé de manière très simple. Les étapes principales du calcul de certaines propriétés électroniques sont illustrées par l'étude d'un exemple.

Au chapitre trois, le code WIEN2k est appliqué pour l'étude de nos matériaux qui sont FeTiSb et FeVSb. Certaines de leurs propriétés électroniques sont présentées et les résultats de cette étude sont discutés en détail.

Enfin, nous présentons les conclusions générales de ce travail à la fin du mémoire.

Références:[1] Schwaz K. et Blaha P, Quantum Mechanical Computations at the Atomic Scale for Material Sciences, Fifth World Congress on Computational Mechanics, Vienna, Austria, July 7-12, 2002.

Chapitre I

Cadre théorique

I.1.Introduction:

la DFT constitue l'une des méthodes les plus utilisées pour les calculs quantiques de structure électronique du solide, car la réduction du problème qu'elle apporte permet de rendre accessible au calcul de l'état fondamental d'un système comportant un nombre important d'électrons. C'est donc une méthode de choix pour l'étude des propriétés physiques de l'état fondamental des solides.

I.2. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT):

Les solides contiennent des noyaux positifs et des électrons négatifs qui interagissent le ctriquement par l'intermédiaire de leurs charges (interactions noyau-noyau, électron électron et noyau-électron). La recherche des solutions de ce système macroscopique (énergie et fonctions d'onde) est appelée *problème à plusieurs corps (ou à N-corps)*. En négligeant 4où M_i est la masse d'un noyau de coordonnées \vec{R}_i , et m_e est la masse d'un électron de coordonnées r_i . Le premier terme est l'opérateur d'énergie cinétique des noyaux, le deuxièmecelui des électrons, et les derniers termes décrivent l'interaction Coulombienne entre électronset noyaux, entre électrons et électrons, et enfin entre noyaux et noyaux.

Pour simplifier ce problème on utilise l'approximation de Born-Oppenheimer [1].

Considérant les noyaux comme étant fixes par rapport aux électrons à cause de leur masse largement supérieure, on réécrit l'équation [II.1] comme suit :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{V}_{ext} \quad (\text{I-2})$$

\hat{T} : opérateur d'énergie cinétique du gaz d'électrons,

\hat{V} : opérateur d'énergie potentielle d'interaction inter-électrons, *noyaux*.

L'équation de Schrödinger est :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I-3})$$

où :

$$E=T+V+V_{ext} \quad (\text{I-4})$$

Cette équation à N-corps étant difficile à résoudre, on utilise pour cela *la théorie de la fonctionnelle de densité (DensityFunctional Theory ou DFT)* conçue par Hohenberg et Kohnen 1964 [1].

Dans cette théorie, l'énergie totale d'un système à N électrons en interaction dans son

état fondamental est fonction uniquement de la densité électronique (ρ).

I.2.1. Théorème de Hohenberg et Kohn :

Théorème 1 : Il existe une relation biunivoque entre le potentiel extérieur (V_{ext}) et la Densité(ρ) de l'état fondamental d'un système à plusieurs électrons (atome, molécule, solide) [1].

Théorème 2 : La fonctionnelle de Hohenberg et Kohn (F_{HK}) est la même pour n'importe quel système à plusieurs électrons (F_{HK} est universelle).

$E_{V_{ext}}$ atteint sa valeur minimale (qui est l'énergie totale à l'état fondamental) pour la densité de l'état fondamental correspondant à (V_{ext}) donné [1].

On peut donc écrire :

$$H\Psi = E\Psi \quad (I-5)$$

$$E_{V_{ext}}[\rho] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{T} + \hat{V} + \hat{V}_{ext}) | \Psi \rangle \quad (I-6)$$

$$= \langle \Psi | (\hat{T} + \hat{V}) | \Psi \rangle + \langle \Psi | (\hat{V}_{ext}) | \Psi \rangle \quad (I-7)$$

$$= F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) \hat{V}_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (I-8)$$

I.2.2. Equation de Kohn-Sham :

En 1965, Kohn et Sham ont décrit la densité électronique comme une somme de densités à une particule, et pour déterminer l'état fondamental de n'importe quel système, ils ont utilisé un principe vibrationnel [4].

Ils ont montré que la vraie densité est donnée par la solution auto-cohérente (self consistent) d'un ensemble d'équations de Schrödinger à une particule [2]. Une équation est donnée par :

$$\hat{H}_{KS}\phi_i = \xi_i\phi_i \quad (I-9)$$

$\phi_i(\vec{r})$: fonction d'onde à une particule

ξ_i : énergie d'une particule.

$$\hat{H}_{KS} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{xc} + \hat{V}_{ext} \quad (I-10)$$

$$\hat{H}_{KS} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{ext} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta\rho} \quad (I-11)$$

\hat{T}_0 : opérateur de l'énergie cinétique d'un électron,

\hat{V}_H : opérateur du potentiel de Hartree-Fock d'un électron,

\hat{V}_{xc} : : opérateur du potentiel d'échange et corrélation où l'expression de l'énergie d'échange et corrélation est donnée comme suit [5] :

$$E_{xc}[\rho] = F_{HK} - T_0[\rho] - V_H[\rho] \quad (I-12)$$

La densité d'électrons est donnée pour la somme (l'ensemble) de tous les états

occupés [4] :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{occ} \phi_i^*(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) \quad (\text{I-13})$$

I.2.3. L'énergie d'échange et corrélation :

L'expression de l'énergie d'échange et corrélation E_{xc} (équation (I.12)) n'étant pas précisée, on utilise alors des approximations pour y remédier. Une approximation des plus utilisées est appelée *l'approximation de la densité locale (Local Density Approximation ou LDA)*, dans laquelle on divise le volume total en volumes plus petits qui donnent un gaz d'électrons homogène [1].

L'énergie d'échange et corrélation totale E_{xc} est alors donnée par [4] :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r})\xi_{xc}(\vec{r})d\vec{r} \quad (\text{I-14})$$

où ξ_{xc} est la densité de l'énergie d'échange et corrélation d'une particule, celle-ci étant supposée plongée dans un gaz d'électrons homogène [4].

Une optimisation de la LDA, appelée approximation de gradient généralisée (*Generalized Gradient Approximation (GGA)*), inclut des termes supplémentaires de gradients de densité électronique [1], où le terme $\xi_{xc}(\rho)$ est remplacé par $\xi_{xc}(\rho, \Delta\rho)$ incluant ainsi l'information venant des variations (gradient) de la densité locale prise homogène dans le cadre de la LDA [3].

I.2.4. Solution de l'équation de Kohn-Sham :

L'équation de Kohn-Sham s'écrit comme suit :

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\vec{\nabla}_m^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}' + \hat{V}_a + \hat{V}_{ext}\right)}_{\hat{H}_{Sp}}\phi_m(\vec{r}) = \xi_m\phi_m(\vec{r}) \quad (\text{I-15})$$

où :

\hat{H}_{Sp} : hamiltonien d'une particule (single particle)

\hat{V}_a : opérateur d'échange,

Les équations de Hartree-Fock et Kohn-Sham étant similaires, les mêmes techniques mathématiques peuvent être utilisées pour trouver leurs solutions. Dans ce cas, on peut mettre les orbitales de Kohn-Sham sous la forme :

$$\phi_m = \sum C_{ma}\phi_a(\vec{r}) \quad (\text{I-16})$$

où $\phi_a(\vec{r})$ sont les fonctions de base et C_{ma} les coefficients du développement. La solution de l'équation de Kohn-Sham est obtenue en trouvant les coefficients [2].

Le calcul des coefficients C_{ma} revient à résoudre l'équation séculaire d'une manière auto-cohérente (Figure I-1) jusqu'à minimisation de l'énergie totale :

$$(H - \xi_m S) C_m = 0 \quad (\text{I-17})$$

H: hamiltonien de Kohn-Sham,

S : matrice de recouvrement (chevauchement).

La nouvelle densité ρ^{out} est [4] :

$$\rho^{out}(\vec{r}) = 2 \sum_i |\phi_i|^2 \quad (\text{I-18})$$

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 - \beta) \rho_{in}^i + \beta \rho_{out}^i \quad (\text{I-19})$$

Où i est le numéro de l'itérations β et un coefficient ou paramètre de mélange.

Les fonctions d'ondes ϕ_i connues sous le nom d'orbitales de Kohn-Sham, peuvent être écrites dans n'importe quelle base complète de fonctions d'ondes. Les bases peuvent être des orbitales atomiques, des fonctions d'ondes Gaussiennes, des ondes planes ou des ondes planes linéarisées et augmentées, etc.

I.2.5. Les systèmes à spins polarisés :

Pour des systèmes à spins polarisés, où l'électron peut avoir deux états possibles (spin haut ou spin bas), la densité du système est donnée par [4] :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{\uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow}(\vec{r}) \quad (\text{I-20})$$

Dans ces systèmes, l'approximation *de la densité locale de spin (Local Spin Density Approximation ou LSDA)* [2].

$$E_{xc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int \rho(\vec{r}) \xi_{xc}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) d\vec{r} \quad (\text{I-21})$$

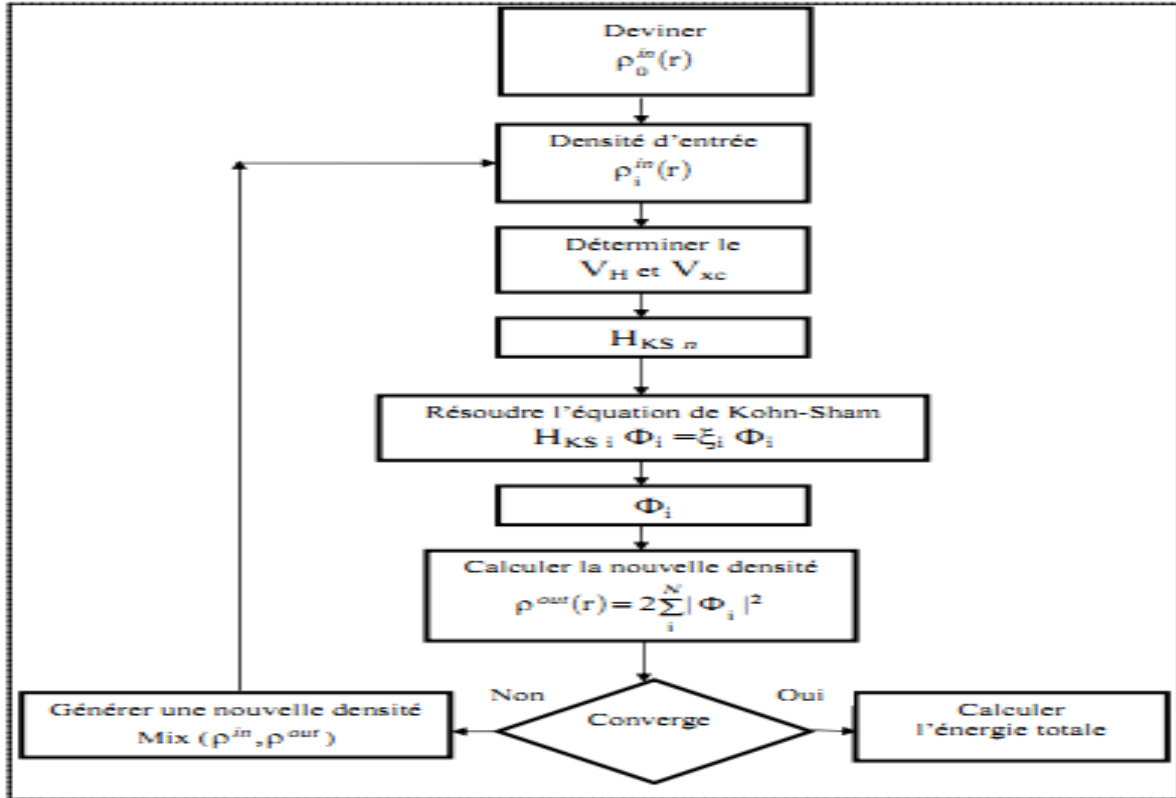


Figure I.1 : Diagramme pour la $n^{ième}$

itération du traitement auto-cohérent (self-consistent) pour résoudre les équations de Hartree-Fock ou de Kohn-Sham [1].

L'énergie d'échange et corrélation dans cette approximation est donnée comme suit :

$$V_{xc}(\vec{r}, \sigma) = \frac{\delta E_{xc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}]}{\delta \rho_{\sigma}(\vec{r})} \quad (\text{I-22})$$

et l'équation de Kohn-Sham est dans ce cas :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_m^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}, \sigma) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' \right] \phi_{m\sigma}(\vec{r}) = \xi_m \phi_{m\sigma}(\vec{r}) \quad (\text{I-23})$$

où σ est l'indice de spin ($\sigma = \uparrow, \downarrow$). La densité électronique totale par spin est :

$$\rho_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{occ} \phi_{m\sigma}^*(\vec{r}) \phi_{m\sigma}(\vec{r}) \quad (\text{I-24})$$

L'énergie totale du système devient alors une fonctionnelle de deux densités de spin, et l'expression devient [2] :

$$E[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = E_{ext}[\rho] + E_{mc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] + \sum_{occ} \xi_m - \int d(\vec{r}) (\rho_{\uparrow}(\vec{r}) V_{xc, \uparrow}(\vec{r}) + \rho_{\downarrow} V_{xc, \downarrow}(\vec{r}) - \frac{1}{2} \int \rho(\vec{r}) V_H(\vec{r}) d(\vec{r})) \quad (\text{I-25})$$

Le terme Coulombien $E_{ext}[\rho]$ est une fonctionnelle de la densité totale. La solution des équations peut être trouvée à l'aide d'une méthode auto-cohérente.

I.3. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FPLAPW):

I.3.1. Méthode des ondes planes augmentées (APW):

À la recherche d'une base qui emploie des fonctions autres que les ondes planes, Slater a stipulé que la solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel constant est une onde plane, tandis que pour un potentiel sphérique c'est une fonction radiale et les harmonique sphérique. Cela fait introduire l'approximation de Muffin tin pour décrire le potentiel cristallin. Selon cette approximation le système se divise en deux régions, illustré sur la figure (I.2) La première région décrit les sphères centrées sur les sites atomiques dans lesquels les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sont employées. La seconde décrit la région interstitielle restante avec l'expansion de base d'ondes planes. Les deux régions de cour et interstitielles sont définies par les fonctions d'ondes

$$\begin{cases} \varphi_S(r) = \sum_{lm} A_{lm} u_l^a(r, E_l) Y_{lm} \\ \varphi_I(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+\vec{k})r} \end{cases} \quad (\text{I-26})$$

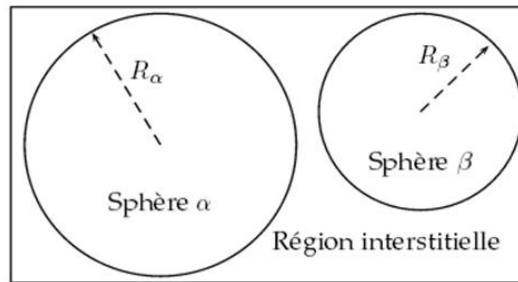


Figure I.2: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques: sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β , respectivement.

Où Ω est le volume de la cellule C_G et A_{lm} sont des coefficients d'expansion, reste la position en coordonnées polaires à l'intérieur de la sphère, \vec{k} est le vecteur d'onde dans la zone de Brillouin irréductible (IBZ), G vecteur de l'espace réciproque, et U_l est la solution numérique de la partie radiale de l'équation de Schrödinger avec l'énergie E_l :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right] r U_l(r) = 0 \quad (\text{I-27})$$

Avec V est la composante sphérique du potentiel. Cette équation définit la fonction radiale orthogonale à n'importe quel état propre du même Hamiltonien qui disparaît à la frontière des sphères. Le chevauchement de ces dernières est construit à partir de:

$$(E_2 - E_1) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 U_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 U_2}{dr^2} \quad (\text{I-28})$$

Avec U_1 et U_2 sont les solutions radiales aux différentes énergies E_1 et E_2 respectivement. Slater introduit une modification à ce choix particulier présentant les ondes planes comme solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant. Cette approximation du potentiel, appelée l'approximation muffin-tin (M_T). Il est toujours nécessaire que les représentations définies dans les expressions (*) soient continues sur les limites des sphères. Ainsi, les A_{lm} doivent être définis en termes des C_G et complètement déterminé par les coefficients d'ondes planes

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\sqrt{\Omega} U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G J_l(|k+g| R_\alpha) Y_{lm}^*(k+g) \quad (\text{I-29})$$

Les orbitales $\Psi_i(r)$ de KS sont exprimés comme combinaison linéaire d'onde APW $\phi(r)$. À l'intérieur de la sphère de M_T , l'orbitale de KS peut être exactement décrite seulement si E dans les fonctions de base de APW est égal à l'énergie propre E_i . Par conséquent, l'ensemble des différentes énergie-dépendantes des fonctions de base de APW doit être trouvé pour chaque valeur propre. Cela mène à un problème non linéaire de valeur propre qui est exigé en programmation. On doit donc changer l'énergie d'essai pour trouver numériquement les zéros du déterminant $|H - E_S|$, un procédé compliqué par la présence d'asymptotes.

I.3.2. Méthode linéaire des ondes planes augmentées et linéarisé (LAPW):

En 1975, Andersen [1] a proposé la méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW), dans laquelle les fonctions de base et leurs dérivées sont continues par adaptation à la fonction radiale et sa dérivée, avec la fixation du paramètre E_i . Ce choix résous les problèmes rencontrés dans la méthode APW. Car le problème était que les $U_{rl}(r, E)$ doivent être construits à l'énergie propre $E = \varepsilon_k^n$ de l'état propre recherché. Il serait utile de récupérer U_{rl} parmi les quantités connues. C'est exactement ce que la méthode d'onde plane linéarité augmentée permet de faire. En effet si on a calculé le U_{rl} pour une certaine énergie E_i alors on peut faire un développement de Taylor [6] :

$$U_l(\varepsilon_k^n, r) = U_l(E_i, r) + (\varepsilon_k^n - E_i) \frac{\partial U_l(r, E)}{\partial E} + O[(\varepsilon_k^n - E_i)^2] \quad (\text{I-30})$$

$$U_l(\varepsilon_k^n, r) = U_l(E_i, r) + (\varepsilon_k^n - E_i) \dot{U}(E_i, r) + O[(\varepsilon_k^n - E_i)^2] \quad (\text{I-31})$$

Substituer les deux premiers termes du développement et les remplacer dans la APW pour l'énergie E_0 fixe, donne définition à LAPW. Mais il reste à déterminer la différence d'énergie $(\varepsilon_k^n - E_i)$ et le coefficient B_{ml} qu'on va introduire :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_i) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_i)] Y_{lm} & \text{pour } r \in S \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+\vec{k})r} & \text{pour } r \in I \end{cases} \quad (\text{I-32})$$

Les coefficients A_{lm} et B_{lm} sont déterminés de telle sorte à satisfaire aux conditions de continuité entre les zones (S) et (I). La définition finale de LAPW est la suivante:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm} & \text{pour } r \in S \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+\vec{k})r} & \text{pour } r \in I \end{cases} \quad (\text{I-33})$$

(*)

On constate bien vite que si le paramètre E_L est égal à la valeur ε_k^n nous nous trouvons dans la méthode des ondes planes augmentées. La condition d'orthogonalité des fonctions augmentées $[A_{lm} U_l(r)]$ et $[B_{lm} \dot{U}_l(r)]$ aux états du coeur est satisfaite unique-ment si ces états du coeur ont le même paramètre d'énergie, donc la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) est très liée au choix de E_l . Ainsi, la synthèse des fonctions de base LAPW consiste à :

1. La détermination des fonctions radiales et leurs dérivées,
2. La détermination des coefficients A_{ml} et B_{ml} qui satisfont les conditions aux limites.

La méthode FP-LAPW assure ainsi la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère MT. Mais, avec cette procédure, les calculs perdent en précision, par rapport à la méthode APW qui reproduit, elle, les fonctions erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre de $(E - E_l)^2$ et une autre sur les énergies de bandes de l'ordre de $(E - E_l)^4$. Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet, avec un seul E_l , d'obtenir toutes les bandes de valence dans un grand intervalle d'énergie. Lorsque cela n'est pas possible, on peut généralement diviser en deux parties la fenêtre énergétique, ce qui est une grande simplification par rapport à la méthode APW. En général, seul est égale à zéro à la surface de la sphère, sa dérivée U_l sera différente de zéro. Par conséquent, le problème de la continuité à la surface de la sphère MT ne se posera pas dans la méthode FP-LAPW.

I.3.3. Approximation de la Densité Locale (LDA):

L'approximation la plus simple pour calculer le terme d'échange et de corrélation est l'approximation de la densité locale (Local Densitys Approximation, LDA). Dans cette approximation, on suppose que la densité électronique varie suffisamment lentement à l'intérieur du système, ce qui permet d'écrire :

$$E_{xc}^{LDA}[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (\text{I-34})$$

Où $n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))$ est la densité d'énergie d'un gaz homogène d'électrons de densité $n(\vec{r})$

En d'autres termes, on postule qu'en chaque point \vec{r} , on remplace le système réel par un gaz homogène d'électrons de densité $n(\vec{r})$. Dans l'approximation LDA le potentiel d'échange corrélation prend la forme :

$$V_{xc}(\vec{r}) = \epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r})) + n(\vec{r}) \frac{d\epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))}{dn(\vec{r})} \quad (\text{I-35})$$

$\epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))$ est l'énergie d'échange-corrélation d'un électron du gaz homogène.

Le terme d'échange d'un tel gaz a été déterminé exactement en interpolant des calculs.

Monte-Carlo par Ceperley et Alder [1], qui ont déterminé le terme d'échange-corrélation

$\epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))$ en fonction de la densité du gaz homogène d'électrons. D'autres formes paramétrisées de $\epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))$ sont disponibles dans la littérature, comme par exemple celles de Vosko, Wilk et Nusair [7] ou de Perdew et Zunger [8]. Toutes ces fonctionnelles conduisent généralement à des résultats proches.

I.3.4. Approximation du Gradient Généralisé (GGA):

Les résultats venant d'un calcul LDA sont souvent adéquats. Mais l'approximation du gradient généralisé (Generalized Gradient Approximation, GGA) donne habituellement de meilleurs résultats sur les énergies de cohésion et les paramètres de maille. Elle a tendance à prendre en compte l'inhomogénéité de la densité électronique par l'introduction dans l'énergie d'échange-corrélation de termes qui dépendent du gradient de la densité. L'énergie d'échange-corrélation en GGA s'écrit de la manière suivante [9] :

$$E_{xc}^{GGA}[n(\vec{r})] = \int F_{xc}(n(\vec{r}), |\nabla n(\vec{r})|) d\vec{r} \quad (\text{I-36})$$

Où F_{xc} est une fonction de la densité locale et du gradient de la densité locale.

A l'instar de $\epsilon_{xc}^{hom}(n(\vec{r}))$ en LDA, la grandeur $F_{xc}(n(\vec{r}), |\nabla n(\vec{r})|)$ doit être paramétrisée d'une façon analytique afin de faciliter les calculs. Il existe nombreuses formes de F_{xc} , dont les plus couramment utilisées sont celles introduites par Becke [10], Perdew et Wang [11] et Perdew, Burke et Ernzerhof [12].

I-3-5. MODÈLE DE HUBBARD :

Le modèle de Hubbard, que l'on se propose d'introduire dans cette section est le modèle le plus simple - du moins dans sa formulation - d'électrons fortement corrélés. Introduit par Hubbard en 1963 [13] pour modéliser les bandes d'énergie étroites d des métaux de transition, il connaît actuellement une nouvelle jeunesse depuis qu'on l'emploie dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique. Sa physique extrêmement riche

est loin d'être complètement élucidée à ce jour. Après l'avoir défini et brièvement justifié, nous discuterons de la pertinence du modèle de Hubbard, et présenterons quelques cas limites intéressants.

I-3-5-1-Obtention du modèle de Hubbard:

Dans une bande d'énergie étroite, les fonctions de Wannier ont un caractère atomique prononcé, c'est-à-dire qu'elles ressemblent fortement aux orbitales atomiques dont elles sont issues. La probabilité de présence des électrons est alors concentrée dans le voisinage des ions du réseau, et le recouvrement de deux fonctions de Wannier centrées sur des sites voisins est faible- L'énergie cinétique (de bande) s'écrit alors:

$$K = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (\text{I-37})$$

Où $c_{ij}^{(t)}$ est l'opérateur de création (annihilation) d'un électron de spin σ dans l'état de Wannier centré au site i . La matrice (hermitienne) des coefficients t_{ij} donne les amplitudes de probabilité de sauter du site i au site j . La première hypothèse importante de Hubbard est de ne prendre en compte qu'une seule bande, alors qu'en réalité, plusieurs bandes peuvent être énergétiquement voisines du niveau de Fermi. La deuxième hypothèse majeure est que l'interaction coulombienne entre deux électrons est beaucoup plus grande lorsque les électrons se trouvent sur le même site atomique (i.e. dans le même état de Wannier) que dans toute autre configuration -*En conséquence, l'énergie potentielle se réduit à

$$U = U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \quad (\text{I-38})$$

Où l'unique élément de matrice non négligé U est l'énergie de repulsion potentiel décroissant comme l'inverse de la distance? mais en réalité, le gaz d'électrons environnant écran très efficacement l'interaction coulombienne, de sorte qu'elle devient réellement négligeable au-delà de quelques dizaines d'ångströms sur site. Cette approximation peut paraître drastique pour un d'ångströms. Hubbard estime U à 20 eV pour les électrons $3d$ des métaux de transition et à 3 eV, en tenant compte de l'écrantage, le premier terme négligé. Finalement, le hamiltonien complet du modèle de Hubbard est:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \quad (\text{I-39})$$

Où l'on fait souvent l'hypothèse supplémentaire que $t_{ij} = -t_{ji}$ si i et j sont des sites voisins, et $t_{ij} = 0$ sinon.

I-3-5-2.Pertinence du modèle de Hubbard:

La capacité du modèle de Hubbard à décrire fidèlement de vrais matériaux est contestable- Dans le cas des métaux de transition, par exemple la proximité des bandes et d

rend la première hypothèse abusive. L'approximation d'une bande unique est également grossière dans le cas des plans CuO_2 des oxydes de cuivre supraconducteurs à haute température critique. Pour ces derniers, un modèle à trois bandes incluant un niveau du cuivre et deux niveaux de l'oxygène [2] semblerait plus réaliste. La possibilité d'appliquer le modèle de Hubbard à de nombreux autres systèmes (fullerènes: polymères: fermions lourds, hélium-3 liquide) témoigne à la fois de ses insuffisances et de sa généralité.

En réalité, ce débat est un peu vain. Il vaut envisager le modèle de Hubbard comme le dénominateur commun de tous ces systèmes fortement corrélés, dont la compréhension complète est un prérequis à tout raffinement ultérieur. En particulier, si la possibilité de supraconductivité dans le modèle de Hubbard est largement controversée, il ne fait guère de doute que son diagramme de phases comporte **une** phase métallique et une phase isolante, éventuellement ordonnée du point de vue magnétique. C'est bien la physique du modèle de Hubbard qui sera discutée dans cette thèse - cela nous paraît un enjeu suffisamment exaltant -, et non celle de matériaux dont un hamiltonien pertinent reste encore à écrire.

I-3-5-3. Cas particuliers:

Le modèle de Hubbard est sujet à des simplifications importantes dans plusieurs limites intéressantes. La plus simple est la limite sans interactions. Si $U = 0$, le modèle décrit un **gaz** de Fermi, qui est un métal paramagnétique parfait. Si au contraire $t = 0$, on se trouve dans la limite **atomique** du modèle de Hubbard.

Dans la limite atomique, les électrons ne peuvent pas se déplacer dans le cristal, et on a affaire à une collection d'atomes indépendants pouvant être vides, simplement occupés, ou doublement occupés. Le système est isolant, et l'énergie d'un état est $U n_2$, où n_2 est le nombre de sites doublement occupés. Si le système est moins que demi-rempli (i.e. avec au plus le même nombre d'électrons que de sites) et que $U > t > 0$, on peut approcher le modèle de Hubbard par le *modèle-f'*, dans lequel toute double-occupation est proscrite.

En général, on r&e le modèle-f en autorisant une double-occupation dans un état intermédiaire (processus virtuel). On obtient alors le modèle t - J : dans lequel intéMent un couplage antiferromagnétique $J = 4t^2/U$ entre les opérateurs de spin en deux sites voisins. A demi-remplissage, le modèle t - J est équivalent au modèle de Heisenberg, décrivant des spins localisés (au lieu d'électrons itinérants) couplés de manière antiferromagnétique. L'existence des limites métallique ($U = 0$) et isolante ($t = 0$) et la présence sous-jacente d'un couplage

antiferromagnétique des spins, incitent à penser que le modèle de Hubbard est capable de rendre compte de toutes les facettes de la transition de Mott.

I.4. Le code WIEN2K:

Tous les calculs dans cette thèse sont effectués avec le code WIEN2K[14]. Le code WIEN2K consiste en différents programmes indépendants qui sont liés par le C-SHELL SCRIPT. L'usage des différents programmes est illustré dans la figure (I -3). L'initialisation consiste à exécuter des programmes auxiliaires qui génèrent :

NN: un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, et qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

SGROUP : détermine le groupe d'espace de la structure définie dans le fichier case .struct.

SYMMETRY : il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

LSTART: un programme qui génère les densités atomiques et, détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.

KGEM : il génère une maille k dans la zone de Brouilloin.

DSTART: il génère une densité de départ pour le cycle SCF (Self Consistent Field), par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Alors un cycle auto cohérent est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit atteint. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : génère le potentiel pour la densité.

LAPW1 : calcule les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : calcule les densités de valence pour les vecteurs propres.

LCORE : calcule les états du cœur et les densités.

MIXER : mélange les densités d'entrée et de sortie.

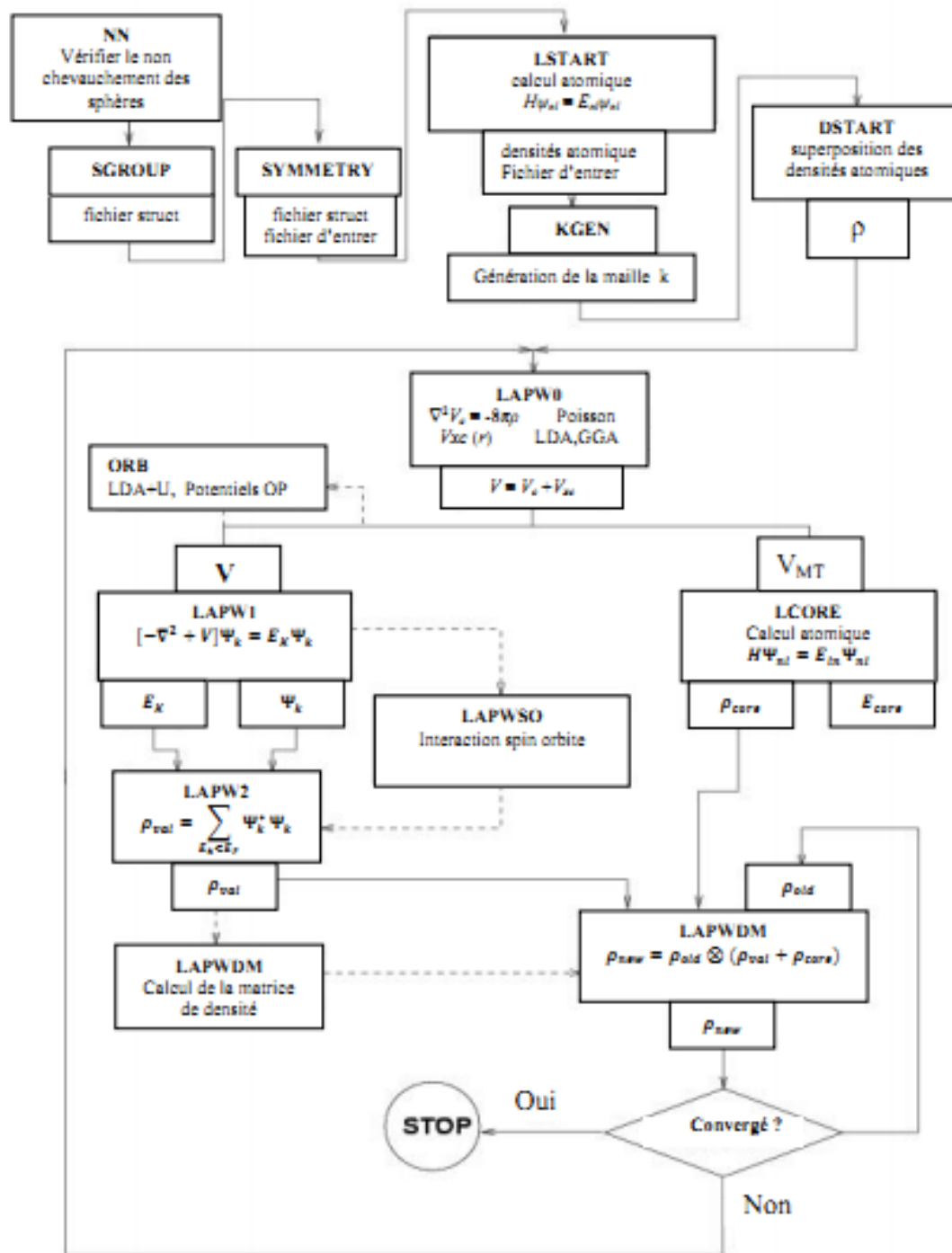


Figure I .3:Structure du programme WIEN2k

Références:

- [1]Cottenier S., Density functional. Theory and the family of (L) AP W-methods: a step-by-step introduction, 2002, disponible online à : www.wien2k.at/reg_user/textbooks.
- [2]Haroun M., Rapport de stage de DEA, Université Louis Pasteur de Strasbourg, France, 2002.
- [3]Ouahab A., Thèse de Doctorat, Université Elhadj Lakhdar Batna, Algérie, 2006.
- Perdew J. P., Burke S and Ernzerhof M 1996 Phys. Rev. Lett. 77 3865.
- [4]Singh David J., Planewaves, Pseudo potentials, and LAPW Method, Kluwer Academic Publishers, Boston, 1994.
- [5]Usuda M., Quasiparticle band-structure calculation based on the FP-LAPW method , PhD thesis, University of Tokyo, 2002.
- [6] D. M. Ceperley et B. J. Alder, Phys. Rev. Lett 45, 566 (1980).
- [7] S. H. Vosko, L. Wilk et M. Nusair, Can. J. Phys 58, 1200 (1980).
- [8] J. Perdew et A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981).
- [9] J. P. Perdew et K. Burke, Int. J. Quant. Chem 57, 309 (1996).
- [10] A. D. Becke, Phys. Rev. A 38, 3098 (1988).
- [11] J. P. Perdew et Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992).
- [12] J. P. Perdew, K. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett 77, 3865 (1996).
- [13] J. Hubbard, Proc. R. Soc. (London) Ser. A 276,238 (1963); 277, 237 (1964); 281, 401 (1964); 285,542 (1965).
- [14] P.Blaho, K.Schwarz, G.K.H.Madsen, D.Kvasnicka, and J.Luitz, Wien2k, an Augmented. Plane Wave Program for calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Vienna, Austria, 2001).

Chapitre III

Génialités sur les alliages heusler

II.1.Introduction:

L'histoire d'une des classes des matériaux les plus passionnants peut être remontée à l'année 1903, Fritz Heusler a découvert qu'un alliage avec une formule de type Cu_2MnAl se comporte comme un matériau ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs ne soient pas des matériaux magnétiques en eux mêmes [1,2].

Cette classe de matériaux remarquables comprend maintenant une vaste collection de plus de 1000 composés, connus sous le nom de Composés ou alliages Heusler. Ils sont des matériaux ternaires semi-conducteurs ou métalliques avec une stoechiométrie de type 01:01:01 (également connus sous le nom "Half-Heusler") ou de type 02:01:01. La figure II.1 montre un aperçu des combinaisons possibles des éléments qui peuvent former ces matériaux.

X_2YZ Heusler compounds

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|----|
| H 2.20 | | | | | | | | | | | | | | | | | He | |
| Li 0.98 | Be 1.57 | | | | | | | | | | | B 2.04 | C 2.55 | N 3.04 | O 3.44 | F 3.98 | Ne | |
| Na 0.93 | Mg 1.31 | | | | | | | | | | | Al 1.61 | Si 1.90 | P 2.19 | S 2.58 | Cl 3.16 | Ar | |
| K 0.82 | Ca 1.00 | Sc 1.36 | Ti 1.54 | V 1.63 | Cr 1.66 | Mn 1.55 | Fe 1.83 | Co 1.88 | Ni 1.91 | Cu 1.90 | Zn 1.65 | Ga 1.81 | Ge 2.01 | As 2.18 | Se 2.55 | Br 2.96 | Kr 3.00 | |
| Rb 0.82 | Sr 0.95 | Y 1.22 | Zr 1.33 | Nb 1.60 | Mo 2.16 | Tc 1.90 | Ru 2.20 | Rh 2.28 | Pd 2.20 | Ag 1.93 | Cd 1.69 | In 1.78 | Sn 1.96 | Sb 2.05 | Te 2.10 | I 2.66 | Xe 2.60 | |
| Cs 0.79 | Ba 0.89 | | | Hf 1.30 | Ta 1.50 | W 1.70 | Re 1.90 | Os 2.20 | Ir 2.20 | Pt 2.20 | Au 2.40 | Hg 1.90 | Tl 1.80 | Pb 1.80 | Bi 1.90 | Po 2.00 | At 2.20 | Rn |
| Fr 0.70 | Ra 0.90 | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | La 1.10 | Ce 1.12 | Pr 1.13 | Nd 1.14 | Pm 1.13 | Sm 1.17 | Eu 1.20 | Gd 1.20 | Tb 1.10 | Dy 1.22 | Ho 1.23 | Er 1.24 | Tm 1.25 | Yb 1.10 | Lu 1.27 | | |
| | | Ac 1.10 | Th 1.30 | Pa 1.50 | U 1.70 | Np 1.30 | Pu 1.28 | Am 1.13 | Cm 1.28 | Bk 1.30 | Cf 1.30 | Es 1.30 | Fm 1.30 | Md 1.30 | No 1.30 | Lr 1.30 | | |

Figure II.1 : Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs.

Étonnamment, les propriétés de nombreux composés Heusler peuvent être prédites en comptant simplement le nombre d'électrons de valence [3].

La grande classe de composés X_2YZ magnétiques montre tous les types de comportement magnétique et propriétés magnétiques multifonctionnelles, telles que les caractéristiques magnéto-optiques [4], magnétocaloriques [5] et magnéto-structurales [6]. Les alliages Heusler ferromagnétiques semi-métalliques sont des semi-conducteurs selon une orientation du spin, alors qu'ils sont métalliques pour l'orientation opposée du spin.

Ces composés montrent une complète polarisation de spin pour les électrons de conduction, ce qui les rend matériaux plus adaptés pour les applications technologiques en spintronique.

Les alliages Heusler ont continuellement attiré l'intérêt en raison de leurs températures de Curie élevées [7]. Actuellement, ils sont utilisés dans les jonctions tunnel magnétiques [8]

II.2. La spintronique:

La spintronique peut se décrire comme une électronique qui exploite non seulement la charge, mais aussi le *spin* des électrons. Son développement a suivi la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) en 1988[9,10]. Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence du *spin* sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott [11] en 1936, a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60[12,13]. La découverte de la GMR 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 avec semi-conducteurs, spintronique moléculaire, spintronique avec multiferroïques, etc.

La spintronique (électronique de spin) en plus de la manipulation de la charge électrique, base de l'électronique conventionnelle, l'électronique de spin exploite le spin dans le but d'avoir de nouveaux phénomènes et de les exploiter dans de nouveaux composants.

La base de ce domaine de la spintronique est la manipulation de l'orientation de l'aimantation dans des dispositifs par une excitation externe tel qu'un champ magnétique (mémoires magnétiques), un champ électrique, etc.

La modification d'aimantation peut être relative entre deux composés dans les structures à multicouches qui fonctionnent par des effets MRG et TMR [14] ou absolue par rapport aux axes cristallins, dans des films magnétiques qui fonctionnent par effet de magnétorésistance anisotrope à effet tunnel (TAMR)[15].

L'aimantation d'un système à l'équilibre est orientée suivant l'axe de facile aimantation. Pour pouvoir manipuler l'aimantation, il faut que le système ait la possibilité de surpasser les barrières d'énergie qui sont liées aux différences d'énergies libres du système selon que son aimantation est alignée suivant différentes orientations cristallographiques.

II.3. Nomenclature des alliages Heusler :

Les alliages Heusler sont des composés ternaires de type ferromagnétique. Ils ont été découverts par Friedrich Heusler en 1903, en étudiant l'alliage Cu_2MnSb . La particularité de cette découverte vient du fait que trois matériaux non magnétiques présentent une aimantation non nulle en les combinant. C'est en 1963, qu'il a été montré que c'est principalement les atomes de Mn qui contribuent au moment magnétique de spin dans ces alliages [16]. Il est intéressant de relever que le Mn pur présente un ordre de type antiferromagnétique. Les propriétés magnétiques des Heusler sont fortement dépendantes de la structure cristalline car c'est l'arrangement des atomes entre eux qui donne lieu au ferromagnétisme.

II.3.1. Alliages demi-Heusler:

En général, les alliages demi-Heusler XYZ peuvent être compris comme des composés constitués de deux parties, une partie covalente et une autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique.

La nomenclature dans la littérature varie beaucoup, allant de trier les éléments par ordre alphabétique, selon leur électronégativité ou d'une façon aléatoire, et donc, toutes les trois permutations possibles peuvent être trouvées. Dans ce mémoire, nous nous en tiendrons à un ordre qui reflète l'électronégativité. L'élément le plus électropositif est placé au début de la formule. Il peut être un élément d'un groupe principal, un métal de transition ou un élément des terres rares.

L'élément le plus électronégatif se trouve à la fin et c'est un élément d'un groupe principal de la seconde moitié de la classification périodique, par exemple, LiAlSi, ZrNiSn, LuAuSn[17-18]. Il doit être noté que le choix de position atomique pour les éléments X, Y et Z ne peut pas être directement dérivé de cette nomenclature et on doit faire attention dans ce choix parce que souvent de mauvaises positions utilisés dans les modèles théoriques mènent à de mauvais résultats.

II.3.2. Alliage full-Heusler :

Dans le passé, les alliages Heusler ont souvent été compris comme alliages intermétalliques, bien que la description comme un composé intermétallique soit plus appropriée en raison de leur caractéristique d'ordre atomique. Les Heusler ont la formule générale X_2YZ , où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique.

Cependant, dans certains cas, Y est remplacé soit par un élément des terres rares, soit par un métal alcalino-terreux.

D'habitude l'élément qui existe en double est mis au début de la formule, tandis que l'élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique est placé à fin, par exemple Co_2MnSi , Fe_2Val [19,20]. Nous avons quelques exceptions où l'ordre peut être changé et dans lesquelles l'ordre est choisi par l'emplacement de l'élément le plus électropositif, par exemple LiCu_2Sb et YPd_2Sb [21]. Ici, l'élément électropositif est mis au début en accord avec la nomenclature l'Union internationale de chimie pure et appliquée (UICPA).

II.4. Structure cristalline :

Il existe deux familles distinctes d'alliages Heusler, l'une avec la composition 01:01:01 et l'autre avec la composition de 02:01:01. Les alliages de la première famille ont la formule générale XYZ et cristallisent dans une structure cubique non-Centrosymétrique (groupe spatial numéro 216, F-43m, C_1b).

Ce type de structure semi-Heusler peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes X, Y et Z [22]. 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 telle que résumés dans le Tableau II.1.

Tableau II.1 : Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type C_1b .

| | 4a | 4b | 4c |
|-----|----|----|----|
| I | X | Y | Z |
| II | Z | X | Y |
| III | Y | Z | X |

Généralement, la structure semi-Heusler peut être considérée comme un sous-réseau ZnS (positions de Wyckoff 4a et 4c) dans lequel les sites octaédriques (4b) sont occupés.

Et la deuxième famille des Full-Heuslers. Les alliages appartenant à cette famille ont une formule chimique de la forme X_2YZ , où X est souvent un métal de transition comme Cu, Ni ou Co, Y est souvent Mn ou Fe, et Z est souvent un semi-conducteur ou Al. La deuxième famille. La maille cristalline des alliages Heusler est cubique. Dans le cas des Full-Heusler, elle est formée par quatre mailles cubiques faces centrées (deux mailles d'atomes X, une d'atomes Y et une d'atomes Z)

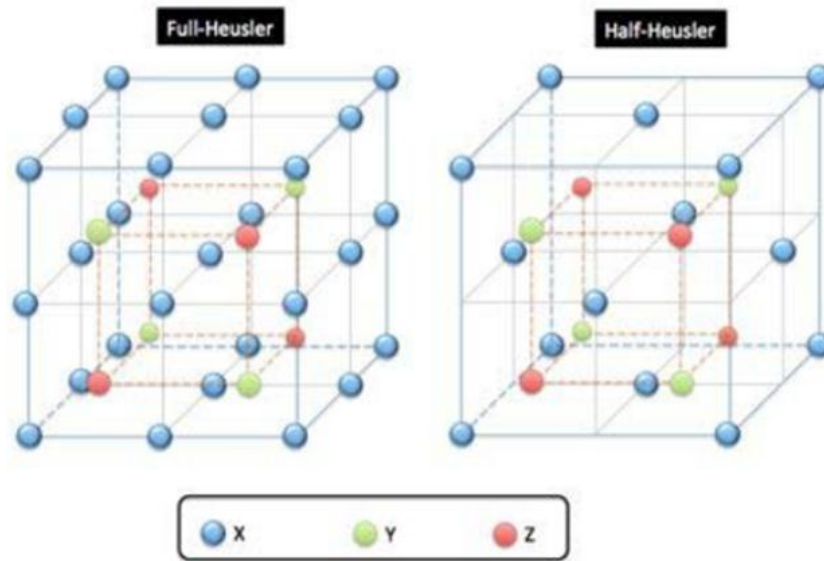


Figure II.2 : Schémas représentatifs des mailles cubiques d'un Full-Heusler (gauche) et d'un Half-Heusler (droite).

Une nouvelle classification se fait en fonction de l'ordre des atomes au sein de la maille cristalline. Les atomes peuvent s'arranger sous trois phases cristallographiques différentes. La première phase, est la phase L_210 où tous les atomes sont parfaitement arrangés. La deuxième phase, est la phase B_2 où les sites correspondants aux atomes Y.

Et Z sont occupés de façon aléatoire par ces deux atomes. Finalement, la troisième phase, est la phase A_2 où tous les sites atomiques sont occupés aléatoirement par les trois types d'atomes. Les trois phases sont représentées L'ordre cristallographique peut modifier significativement les propriétés magnétiques des alliages Heusler comme l'aimantation à saturation ou la température de Curie.

I.5. Le magnétisme et alliages Heusler:

En 1903, F. Heusler a constaté que le composé Cu_2MnAl devient ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs non sont pas ferromagnétiques [1,2]. Cependant, il a fallu trois décennies jusqu'à ce que la structure cristalline ait été déterminée à être cubique à faces centrées [23,24].

Malheureusement, ils sont tombés dans l'oubli dans les décennies suivantes, et seulement peu de rapports sur la synthèse de nouveaux composés Heusler ont été édités dans les années 70 [25, 26].

Il a fallu attendre la prédiction du ferromagnétisme semi-métallique dans $MnNiSb$ par de Groot et al. [27] et dans Cu_2MnSn par Kübler et al. [28] en 1983, pour que les matériaux Heusler retrouvent un intérêt scientifique.

Les matériaux XYZ présentent un sous-réseau magnétique puisque seuls les atomes sur les sites octaédriques peuvent porter un moment magnétique, comme indiqué dans la figure II.3. Dans la section I.4.2, il a été déjà mentionné que les matériaux semi-Heusler magnétiques de formule XYZ n'existent que pour $X=Mn$ et R_e . Ceci résulte de la nature localisée des quatre électrons 3d de Mn^{+3} et des électrons 4f, respectivement, qui portent le moment magnétique.

Expérimentalement, un petit moment magnétique induit se retrouve également dans le nickel et aussi dans les métaux de transition qui se trouvent dans la fin de la liste. En effet, cette circonstance ne peut être négligée du point de vue des règles simples. Parmi les composés Heusler contenant Mn^{+3} connus dans la littérature la plupart des composés semi-conducteurs ou des systèmes métalloïdes sont antiferrmagnétiques, ayant une faible température de Néel [29,30].

Étant donné que les ions magnétiques occupent le sous réseau NaCl, la distance est grande ce qui suggère une interaction magnétique basée sur un mécanisme de super-échange. Seuls quelques composés semi-Heusler ferromagnétiques sont décrits dans la littérature, par exemple NdNiSb et VCoSb[31,32]. Les composés semi-Heusler contenant du Mn sont ferromagnétiques semimétalliques à haute température de Curie.

Dans les composés Heusler X_2YZ la situation est complètement différente à cause des deux atomes X qui occupent les sites tétraédriques, ce qui permet une interaction magnétique entre les atomes X et la formation d'un second sous-réseau magnétique plus délocalisé (Figure II. 3).

En raison de ces deux sous-réseaux magnétiques différents, les composés Heusler X_2YZ peuvent montrer toutes sortes de phénomènes magnétiques, aujourd'hui plusieurs types sont connus telque ferromagnétisme, ferrimagnétisme et ferromagnétisme semi-métallique

II.5.1.Composés semi-Heusler:

Les composés semi-Heusler ne possèdent qu'un seul sous-réseau magnétique puisque seuls les atomes sur les sites octaédriques peuvent porter un moment magnétique, comme indiqué dans la Figure II.3. Dans la littérature, il existe de nombreux exemples de composés ferrimagnétiques ou antiferromagnétiques, qui sont facilement supposés être des matériaux semi-Heusler. En fait, la plupart de ces matériaux, par exemple CrMnSb, FeMnSb, cristallisent dans des types de structure différente de la structure semi-Heusler [30].

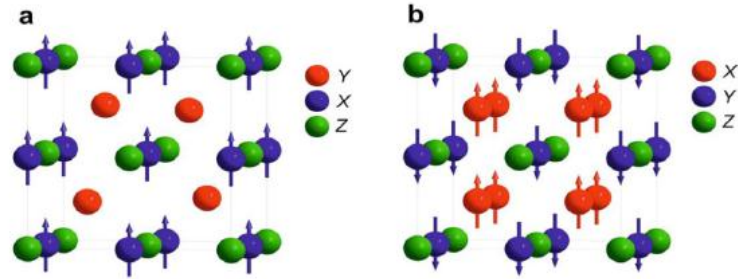


Figure II.3 : (a) Composés semi-Heusler XYZ qui montrent un seul sous-réseau magnétique puisque seuls les atomes sur les sites octaédriques portent un moment magnétique localisé. (b) composés Heusler X_2YZ qui ont deux sous-réseaux magnétiques pouvant se coupler ferromagnétiquement ou antiferromagnétiquement.

II.5.2. Composés Heusler:

Dans les alliages Heusler, deux sous-réseaux magnétiques permettent le couplage antiferromagnétique des moments magnétiques atomiques, ce qui conduit à des matériaux ferrimagnétiques ou ferromagnétiques voire complètement ferrimagnétiques compensés (voir Figure II.3). Une combinaison de ce qui précède explique règle Slater-Pauling et la règle Kübler qui permet la prédiction du ferrimagnétisme semi-métallique complètement compensé dans les alliages Heusler avec 24 électrons de valence [33].

Dans ces composés, les deux atomes sur le site X doivent compenser le moment magnétique de l'atome du site Y (surtout) Mn . La condition préalable à Mn d'être situé dans la position Y, c'est qu'il est le métal de transition le plus électropositif dans le composé (cf. section I.3). Les seuls éléments possibles pour occuper la position X sont, par conséquent, Fe, Co, Ni, Cu et Zn, ainsi que Mn lui-même. Le nombre total d'électrons de valence de 24 limite les combinaisons possibles pour les composés binaires Mn_2MnZ , avec Z étant un élément du troisième groupe principal de la classification périodique. Wurmehl et al. étaient les premiers à concevoir le matériau Mn_2MnGa (ou simplement Mn_3Ga). Ceci a conduit à un matériau ferrimagnétique semi-métallique totalement compensé avec la structure Heusler L_21 dont Mn^{+3} occupe la position octaédrique (règle Kübler) [33]. Les deux moments magnétiques des atomes de manganèse sur des positions tétraédriques annulent le moment de Mn^{+3} donnant une aimantation de valeur zéro.

La synthèse de Mn_3Ga a toutefois révélé que ce composé ne cristallise pas dans la structure de Heusler ordonnée, mais dans une autre structure quadratique déformée de prototype [34, 35].

Les calculs *ab initio* pour cette structure cristalline déformée montrent que le Mn_3Ga est ferrimagnétiquement ordonné de moment magnétique total d'environ $1.7\mu_B$.

Une densité d'état électronique des spins minoritaires supérieure à la densité d'état électronique des spins majoritaires au niveau de Fermi E_f indique une différence distincte dans la conductivité entre les deux directions de spin. En outre, une anomalie magnétique prononcée a été observée, ce qui suggère que Mn_3Ga est un ferrimagnétique magnétique frustré. En raison de la distorsion tétragonale, ce composé est un candidat prometteur en tant qu'électrode avec une anisotropie magnétique perpendiculaire pour les dispositifs de couple de spin.

Un comportement ferrimagnétique est également observé dans les composés Mn_2YZ avec un nombre d'électrons de valence différent de 24. Si la structure Heusler inverse est formée et un atome de Mn est situé dans un site du réseau à coordination octaédrique, le moment magnétique local de Mn est fortement localisé (règle de Kübler) et peut être partiellement compensé par les atomes dans les positions de X. La structure Heusler inverse est formée si la charge nucléaire de Y est supérieure à celle de Mn, soit seulement pour $Z(O) \geq Mn$ (voir Figure II.4 pour comparaison).

Cependant, une structure en spirale magnétique incommensurable avec aimantation zéro a été observée pour le composé Mn_3Si [36, 37]. Ceci s'explique par un échange direct entre les atomes de Mn sur les positions Y stimulant la formation d'une configuration antiferromagnétique colinéaire des moments de ce sous-réseau [38] et une interaction d'échange avec les atomes de Mn sur les positions X_2 , qui stimulent une orientation parallèle d'autres moments Mn. Ainsi, une compétition entre les interactions ferromagnétique et antiferromagnétique efficace conduit à la formation de la configuration colinéaire en spirale.

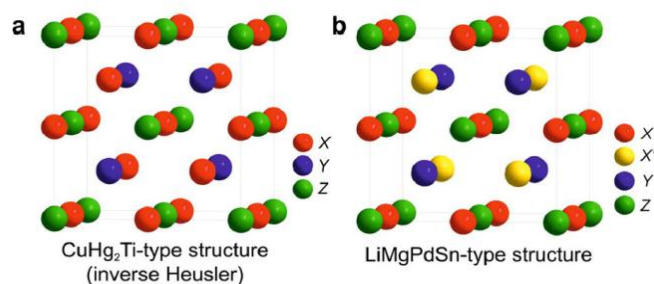


Figure II.4: Structure Heusler inverse $CuHg_2Ti$ (a), structure quaternaire $LiMgPdSn$ (b).

Références:

- [1] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG 5 (1903) 220.
- [2] F. Heusler, Verh DPG 5(1903) 219.
- [3] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, AngewChemInt Ed 46 (2007) 668.
- [4] P.G. Van Engen, K.H. J. Bushow, R. Jongebreuer, M. Erman, ApplPhysLett 42 (1983)202.
- [5] T. Krenke, E. Duman, M. Acet, E.F. Wassermann, X. Moya, L. Manosa, Nat Mat 4 (2005)450.
- [6] R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, H. Morito, S. Okamoto, O. Kitakami, Nature 439 (2006)957.
- [7] S. Wurmehl, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H.J. Lin, ApplPhysLett 88 (2006) 032503.
- [8] W. Wang, E. Lui, M. Kodzuka, H. Sukegawa, M. Wojcik, E. Jedryka, Phys Rev B 81 (2010)140402.
- [9] 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 (1988) 2472.
- [10] G. Binash, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys. Rev. 39 (1989) 4828.
- [11] N.F. Mott, Proc. Roy. Soc. A 153 (1936) 699.
- [12] A. Fert et I. A. Campbell, Phys. Rev. Lett. 21 (1968) 1190, J. Physique (1971) C1-46, J. Phys. F 6 (1976) 849.
- [13] B. Loegel et F. Gautier, J. Phys. Chem. Sol. 32 (1971) 2723.
- [14] A. Barthèlèmy, A. Fert et F. Petroff, "Handbook of Magnetic Materials", K. H. J. BUSCHOW North-Holland, 12, 1 (1999).
- [15] M. Elsen, H. Jaffres, R. Mattana, L. Thevenard, A. Lemaitre et J.M. George, Phys. Rev. B., 76, 144415 (2007).
- [16] K. Endo, T. Ohoyama, and R. Kimura. On the magnetic moment of Mn in aluminum Heusler alloy. Journal of the Physical Society of Japan, 19 :1494- 1495, 1964.
- [17] H.U. Schuster, H.W. Hinterkeuser, W. Schäfer, G. Will, Z Naturforsch B 31 (1976)1540.
- [18] P.J. Sebastian, H. Eckert, S. Rayaprol, R.D. Hoffmann, R. Pöttgen, Solid State Sci 8(2006)560.

- [19] L. Ritchie, G. Xiao, Y. Ji, T.Y. Chen, C.L. Chien, M. Zhang, *Phys Rev B* 68 (2003)104330.
- [20] Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, U. Mizutani, *Phys Rev Lett* 79(1997) 1909.
- [21] M. Morcrette, D. Larchera, J.M. Tarascona, K. Edstromb, J.T. Vaugheyc, M.M. Thackerayc, *ElectrochimActa* 52 (2007) 5339.
- [22] P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, *Landolt-Börnstein - group III condensed matter*, vol. 19C. Berlin: Springer; 1988. 75-184.
- [23] O. Heusler, *Ann Phys* 19 (1934) 155.
- [24] A.J. Bradley, J.W. Rodgers, *Proc Roy Soc A* 144 (1934) 340.
- [25] P.J Webster, *J PhysChem Solids* 32 (1971) 1221.
- [26] S. Brooks, J.M Williams, *Phys. Stat Sol A* 32 (1975) 413.
- [27] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, *Phys Rev Lett* 50 (1983) 2024.
- [28] J. Kübler, A.R. Williams, C.B. Sommers, *Phys Rev B* 28 (1983) 1745.
- [29] K. Gofryk, D. Kaczorowski, T. Plackowski, A. Leithe-Jasper, Y. Grin, *Phys Rev B* 72(2005) 094409.
- [30] F. Casper, C. Felser, *Z AllgemAnorgChem* 634 (2008) 2418.
- [31] L. Heyne, T. Igarashi, T. Kanomata, K.U. Neumann, B. Ouladdiaf, K.R.A. Ziebeck, *J PhysCondens Matter* 17 (2005) 4991.
- [32] K. Hartjes, W. Jeitschko, *J Alloys Compd* 226 (1995) 81.
- [33] S. Wurmehl, H.C. Kandpal, G.H. Fecher, C. Felser, *J PhysCondens Matter* 18 (2006) 6171.
- [34] J. Winterlik, B. Balke, G.H. Fecher, C. Felser, *Phys Rev B* 77 (2008) 054406.
- [35] B. Balke, G.H. Fecher, J. Winterlik, C. Felser, *ApplPhysLett* 90 (2007) 152504.
- [36] C. Pfleiderer, J. Beouf, H. Lohneysen, *Phys Rev B* 65 (2002) 172404.
- [37] S. Tomiyoshi, Y. Yamaguchi, M. Ohashi, *Phys Rev B* 36 (1987) 2181.
- [38] M. Hortami, L. Sandratskii, P. Zahn, I. Mertig, *J ApplPhys* 105 (2009) 07E506.

Chapitre III

RESULTATS ET DISCUSSION

III.1. Introduction :

Au cours de ce chapitre, nous présentons les résultats de calcul de la stabilité structurale et des propriétés électroniques, magnétiques et élastiques des composés FeYSb (Y=Ti, V). La première partie dans ce chapitre consiste à déterminer les paramètres de données utilisés dans le calcul. La seconde consiste à étudier les propriétés citées précédemment.

III.2.Détails de calcul et discussions:

III.2.1.Étude de convergence :

Nous allons dans ce chapitre ,présenté nos résultats de calcul des structures de bandes et des densités et électroniques propriétés élastiques obtenues en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) [1]. Cette méthode de premier principe basée sur la théorie de fonctionnelle de la densité (DFT) [2] est implémentée dans le code Wien2k [3]. Nous avons adaptées approximations(LDA), (LDA+U) et du gradient généralisé (GGA) de Perdew,Burker et Ernzhof (PBE96)[4].

Les fonctions de base, les densités électroniques, ainsi que les potentiels sont développés en combinaisons d'harmoniques sphériques autour des sites atomiques, c'est-à dire dans les sphères atomiques avec un rayon de coupure $I_{max}= 10$, et en série de Fourier dans les régions interstitielles.

Afin d'obtenir l'exactitude des calculs auto-cohérent, nous avons testé la convergence des paramètres numériques qui gouvernent la précision de la méthode FP-LAPW pour chaque composé. Dans cette méthode, les paramètres les plus importants sont : le nombre des points spéciaux « k » utilisés pour l'intégration dans la zone de Brillouin ; et le produit entre le plus petit rayon de muffintin R_{mt} et le vecteur d'onde de coupure dans l'espace réciproque $K_{max}(R_{mt} \times K_{max})$. Ce produit détermine le nombre d'ondes planes dans les régions interstitielles. Le choix particulier des rayons muffintin R_{mt} est effectué de telle façon que la région interstitielle entre les différentes sphères soit la plus petite possible afin d'assure une convergence rapide. En effet, des petites valeurs de ces rayons impliquent une région En effet, des petites valeurs de ces rayons impliquent une région interstitielle plus grande et comme cette région est traitée par des ondes planes le temps de calcul sera plus important. Ces valeurs dépendent de la particularité de l'étude ainsi que de la nature atomique et la structure du système étudié. Nous avons effectué plusieurs tests de convergence sur une large gamme des systèmes afin de déterminer le paramètre $R_{mt} \times K_{max}$ et le nombre des points spéciaux k. Les rayons muffin-tin que

nous avons utilisés pour les différentes atomes (Fe, Ti, V, Sb) sont choisis telle sorte qu'il n'y aura aucun recouvrement des sphères muffin-tin. Les valeurs minimales R_{mt} , en unité atomique (u.a), sont données comme suit : 2.2 pour (Fe, Ti, V) ; 2.35 pour Sb Le choix de paramètre de coupure $R_{mt} \times K_{max}$ la grille des points spéciaux « k » dans la zone de Brillouin irréductible, ainsi que le G_{max} choisis pour nos calculs de l'énergie total et les autres propriétés sont donnés dans les tableaux ci-dessous.

Tableau III.1: les variations de les énergies E en fonction de RK_{max} .

| FeTiSb | | |
|------------|-----------------|--------------|
| RK_{max} | E | $\Delta E/E$ |
| 6 | -17392,19406255 | 1,17629E-05 |
| 6.5 | -17392,29450915 | 5,98754E-06 |
| 7 | -17392,34836689 | 2,89091E-06 |
| 7.5 | -17392,37499765 | 1,35974E-06 |
| 8 | -17392,38762983 | 6,33436E-07 |
| 8.5 | -17392,39382316 | 2,77342E-07 |
| 9 | -17392,39674724 | 1,09218E-07 |

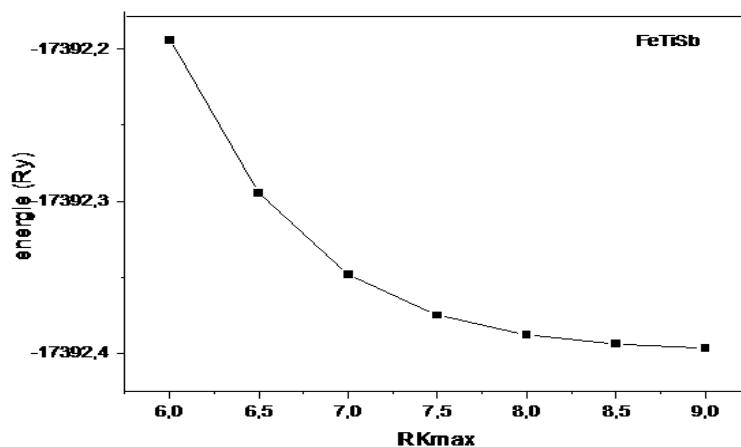


Figure III.1: l'étude de convergence du matériau FeTiSb.

Tableau III.2: les variations de les énergies E en fonction de $nkpt$.

| FeTiSb | | |
|--------|-----------------|----------------|
| $nkpt$ | E | $\Delta E / E$ |
| 56 | -17392,34835409 | -9,63642E-10 |
| 72 | -17392,34833517 | 1,24192E-10 |
| 84 | -17392,34841306 | -4,35421E-09 |
| 104 | -17392,34830557 | 1,82609E-09 |
| 120 | -17392,34840381 | -3,82237E-09 |
| 145 | -17392,34838625 | -2,81273E-09 |
| 165 | -17392,34834041 | -1,77089E-10 |
| 195 | -17392,34829915 | 2,19522E-09 |

Tableau III.3: les variations de les énergies E en fonction de G_{max} .

| FeTiSb | | |
|-----------|-----------------|----------------|
| G_{max} | E | $\Delta E / E$ |
| 12 | -17392,34837603 | 1,01194E-10 |
| 13 | -17392,34837785 | -3,44986E-12 |
| 14 | -17392,34837900 | -6,95708E-11 |
| 15 | -17392,34837892 | -6,49711E-11 |
| 16 | -17392,34838065 | -1,6444E-10 |
| 17 | -17392,34837840 | -3,50728E-11 |
| 18 | -17392,34837862 | -4,77222E-11 |
| 19 | -17392,34837779 | -1,05219E-10 |

Tableau III.4: les variation de les énergies E en fonction de RK_{max} .

| FeVSb | | |
|------------|-----------------|--------------|
| RK_{max} | E | $\Delta E/E$ |
| 6 | -17392,22323629 | 1,15088E-05 |
| 6.5 | -17392,32118407 | 5,87718E-06 |
| 7 | -17392,37354744 | 2,866E-06 |
| 7.5 | -17392,40032002 | 1,32716E-06 |
| 8 | -17392,41281219 | 6,08905E-07 |
| 8.5 | -17392,41880951 | 2,64081E-07 |
| 9 | -17392,42167611 | 9,92622E-08 |
| 9.5 | -17392,42291778 | 2,78708E-08 |

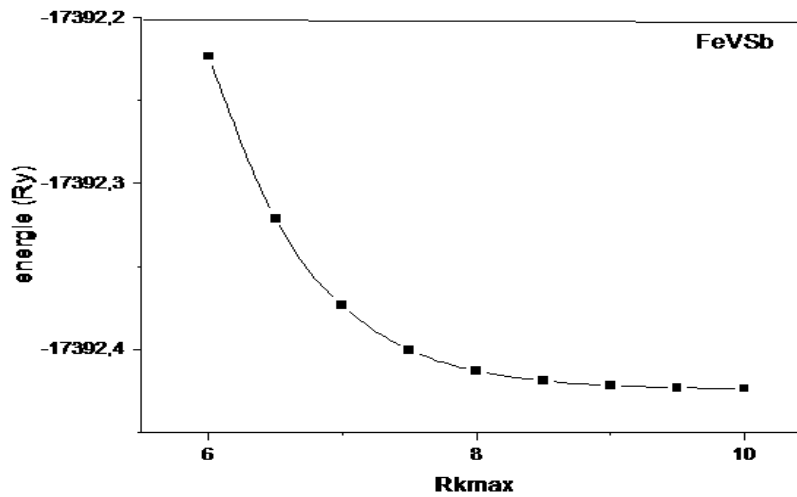
**Figure III.2:** l'étude de convergence du matériau FeVSb.

Tableau III.5: les variations de les énergies E en fonction de $nkpt$.

| FeVSb | | |
|--------|-----------------|----------------|
| $nkpt$ | E | $\Delta E / E$ |
| 56 | -17392,37364724 | 9,19081E-09 |
| 72 | -17392,37385751 | -2,89897E-09 |
| 84 | -17392,37379564 | 6,58335E-10 |
| 104 | -17392,37377316 | 1,95085E-09 |
| 120 | -17392,37362954 | 1,02085E-08 |
| 145 | -17392,37383928 | -1,85081E-09 |
| 165 | -17392,37358145 | 1,29735E-08 |
| 195 | -17392,37368069 | 7,26755E-09 |

Tableau III.6: les variations de les énergies E en fonction de G_{max} .

| FeVSb | | |
|-----------|-----------------|----------------|
| G_{max} | E | $\Delta E / E$ |
| 12 | -17392,37364731 | 9,19081E-09 |
| 13 | -17392,37364949 | -2,89897E-09 |
| 14 | -17392,37365471 | 6,58335E-10 |
| 15 | -17392,37364864 | 1,95085E-09 |
| 16 | -17392,37364938 | 1,02085E-08 |
| 17 | -17392,37364935 | -1,85081E-09 |
| 18 | -17392,37364912 | 1,29735E-08 |
| 19 | -17392,37364919 | 7,26755E-09 |

Après l'étude de convergence Ce qui justifie notre choix pour les propriétés structurales et électroniques de la grille des K-points (1800) ; et $Rk_{max} = 8$; $G_{max} = 15$ avec une tolérance d'énergie de 10^{-6} .

Donc notre choix des paramètres d'entrée sont : le nombre des point est point ; $G_{max} = 15$; $Rk_{max} = 8$. Dans cette étude, les états $Fe(4s^2 3d^6)$, $Ti(4s^2 3d^2)$, $V(4s^2 3d^3)$ et $Sb(5s^2 5p^3)$ sont traités comme des électrons de valence.

III.2.2.Optimisation structural:

Une structure optimisée correspond à une énergie totale minimale, avec des atomes relaxés c.à.d. Pour atteindre cette structure, on doit varier les paramètres de volume en fonction de l'énergie totale, et l'énergie minimale est celle qui correspond aux paramètres de mailles optimales.

Nous avons effectué une optimisation structurale sur les alliages étudiés pour l'état ferromagnétique . Les courbes d'optimisations des volumes de maille sont présentées dans les Figures III.3, III. 4 et III.5. les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau III.7

On remarque que dans tous les cas, notre résultats sont en accord avec celle présentés par réf [5]. Dans les deux cas, Les paramètres de maille optimisés obtenus avec GGA-PBE était légèrement plus élevé que les valeurs expérimentales.

Il faut citer que Les paramètres de réseau à l'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume, en utilisant l'équation de Murnaghan [6] donnée par:

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

E_0, V_0 :Sont respectivement l'énergie et le volume à l'équilibre.

B : le module de compression, il est défini comme suit :

$$B = V_0 \left. \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right|_{V=V_0}, \quad (\text{III-2})$$

B' :La dérivée du module de compression

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P}, \quad (\text{III-3})$$

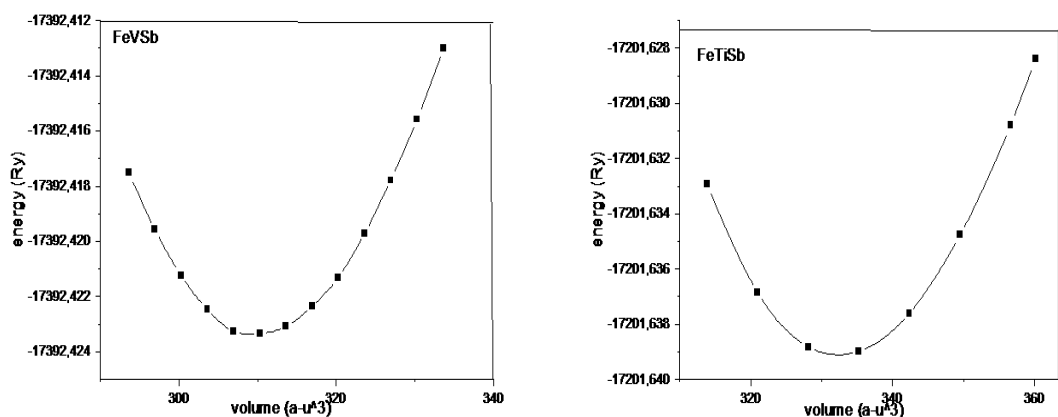


Figure III.3: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre LDA.

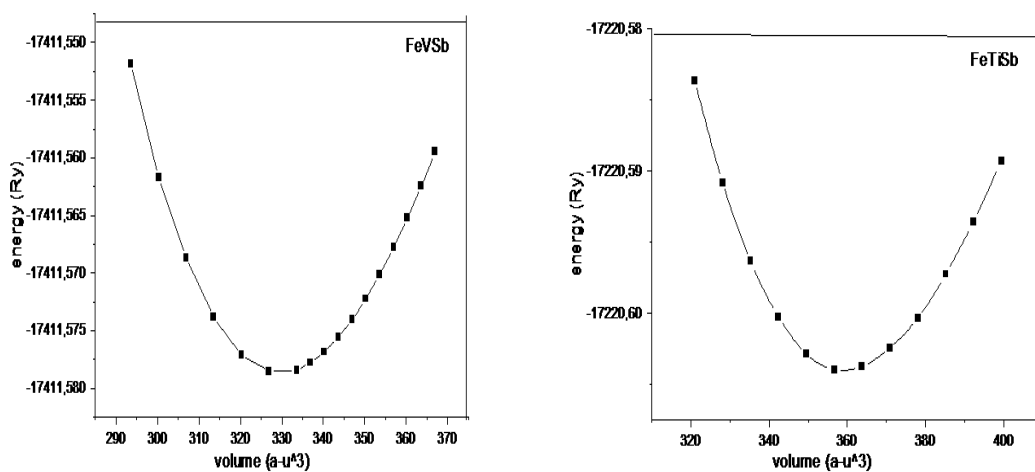


Figure III.4: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre GGA.

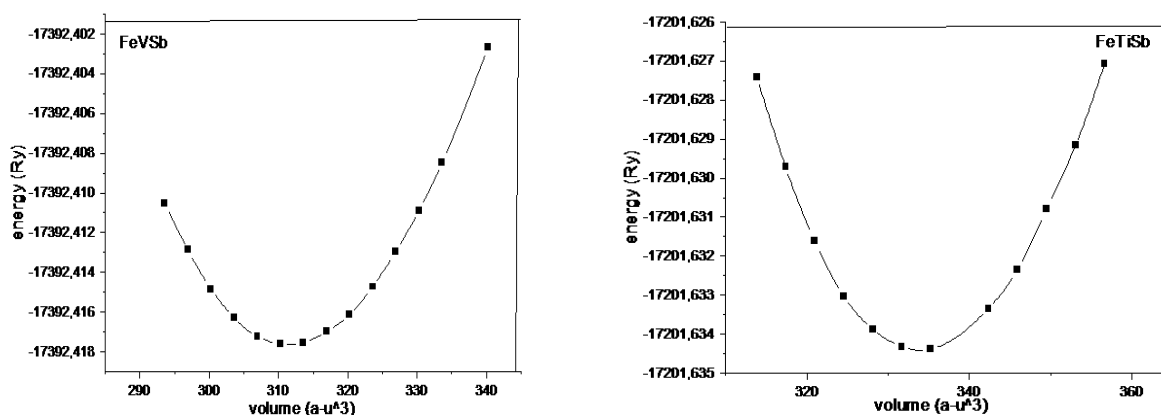


Figure III.5: Variation de l'énergie totale en fonction du volume des composés FeTiSb et FeVSb par le cadre LDA+U.

Tableau III.7 : Les paramètres de maille optimisés en (Å).

| Matériau | $A_{\text{experimental}}$ | a_{obtenu} | | |
|----------|---------------------------|---------------------|-------|-------|
| | | LDA | GGA | LDA+U |
| FeTiSb | 5,957 ^(a) | 5,818 | 5,972 | 5,826 |
| FeVSb | 5,826 ^(a) | 5,684 | 5,802 | 5,693 |

(a) :Ref [5]

III.2.3. Moments magnétiques et propriétés électroniques:

Après nous avons calculé les paramètres de réseau optimisés, nous avons utilisé ces valeurs pour déterminer les autres propriétés. Il est bien connu que, le moment magnétique total dans les alliages half-Heusler suit la règle Slater-Pauling [7, 8]. Il sera égal à $M_T = N_V - 18$, où M_T est le moment magnétique de spin par unité de cellule et N_V est le nombre total d'électrons de valence. Nous regroupé les valeurs obtenues dans le tableau III.8. Les moments magnétiques totaux calculés, des deux composés, ne sont pas en accord avec la règle Slater-Pauling. Nous avons trouvé que les sites de Ti contribuent beaucoup plus au moment magnétique dans le composé FeTiSb. Pour l'autre alliage les atomes de V, ont un moment anti

parallèle. Toutes les approximations adoptées montrent que le moment magnétique de Sb est négatif et il ne participe pas directement au moment magnétique total.

Tableau III.8:Total et moments magnétiques partiels dans (μ B) par cellule d'unité.

| Matériaux | N_V | Fonctionnel | Moment magnétique | | | | |
|-----------|-------|-------------|--------------------------|-----------|---------|----------|-------|
| | | | $M_{T\text{-précédent}}$ | M_{Fe} | M_y | M_{Sb} | M_T |
| FeTiSb | 17 | LSDA | - | 0,79665 | 0,04410 | 0,2731 | 0,98 |
| | | LDA+U | - | 0,75352 | 0,07010 | 0,02950 | 0,98 |
| | | GGA-PBE | - | 1,28213 | 0,30846 | 0,01924 | 0,97 |
| FeVSb | 18 | LSDA | - | -0,001184 | 0,01981 | -0,00109 | 0,00 |
| | | LDA+U | - | -0,00168 | 0,00613 | -0,00071 | 0,00 |
| | | GGA-PBE | - | -0,00831 | 0,00927 | 0,00214 | 0,00 |

Les figures III.10 et III-11 représentent les tendances de la densité d'états (DOS); il comprend également une comparaison entre les résultats obtenus par la LDA+U et GGA. La densité des états

Partiels (PDOS) indique que FeTiSb et FeVSb alliages sont principalement occupés avec le 3d-Fe et 3d-Ti (3d-V) électrons.

La polarisation de spin au niveau de Fermi est une propriété importante dans le domaine de la spintronique, il définit par l'expression suivante :

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}, \quad (\text{III-4})$$

N_{\uparrow} et N_{\downarrow} sont les densités dépendant du spin des états à E_F

Les alliages FeTiSb et FeVSb ne sont pas polarisés en spin. L'existence de des états énergétiques près de niveau de Fermi justifie le caractère métallique, et ces matériaux ne sont plus appropriés pour des applications spintronique

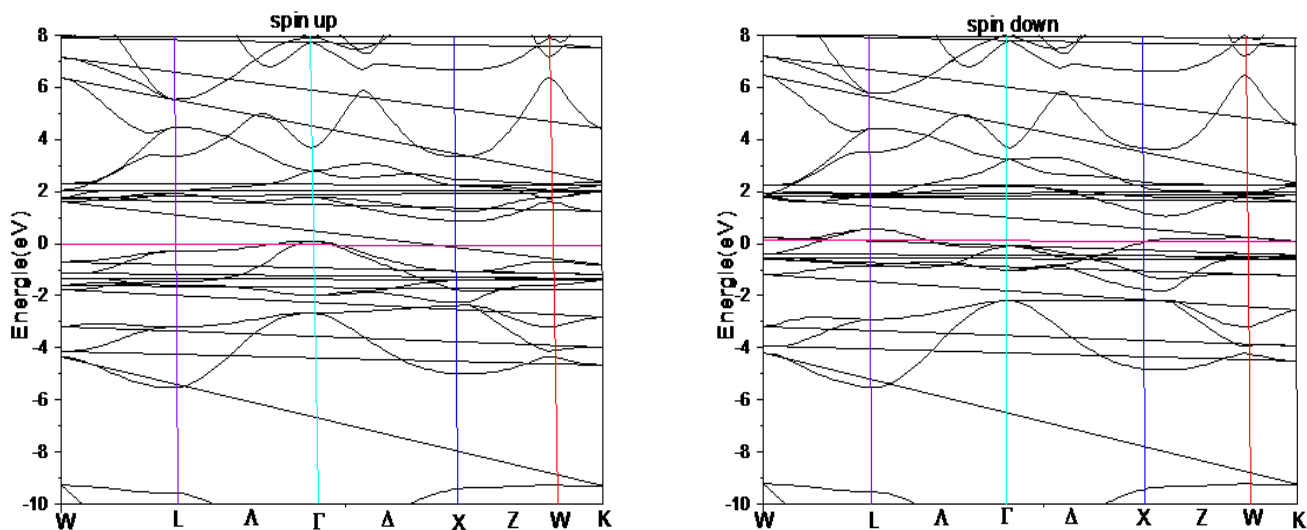


Figure III. 6 : structure des bandes FeTiSb (up et down) par le cadre GGA.

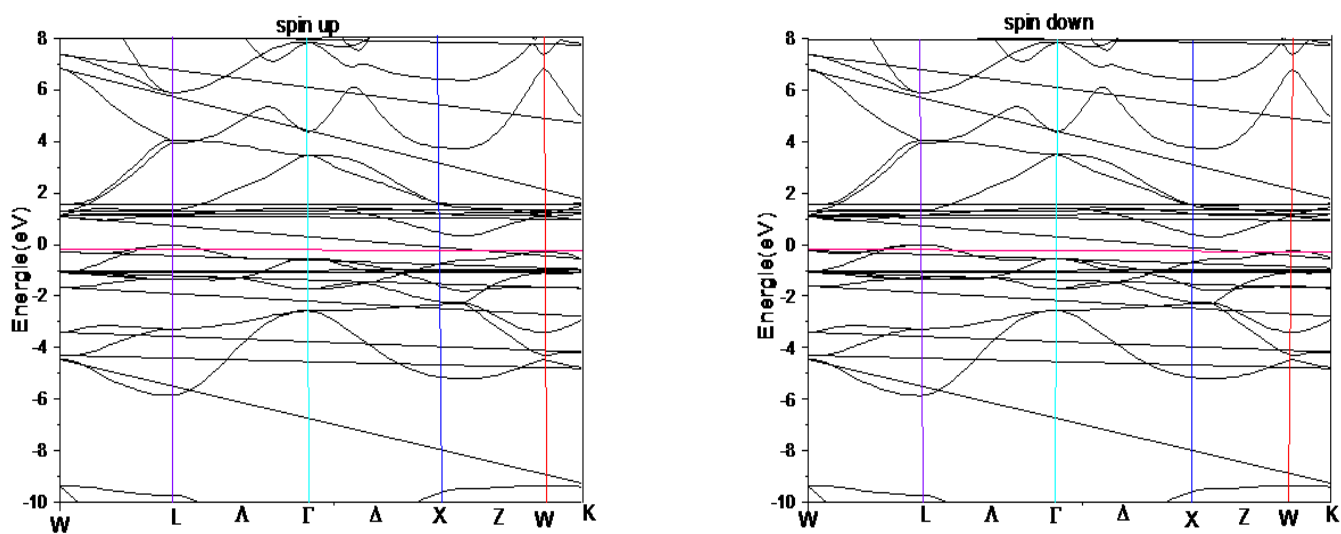


Figure III. 7 : structure des bandes FeVSb (up et down) par le cadre GGA.

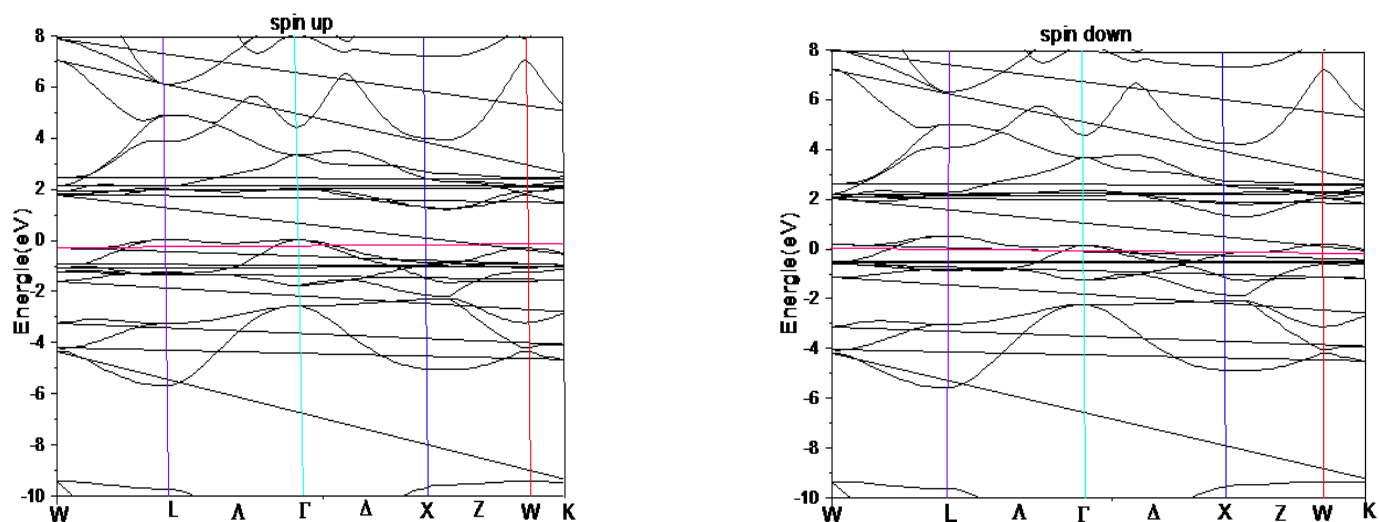


Figure III. 8 : structure des bandes FeTiSb (up et down) par le cadre LDA+U.

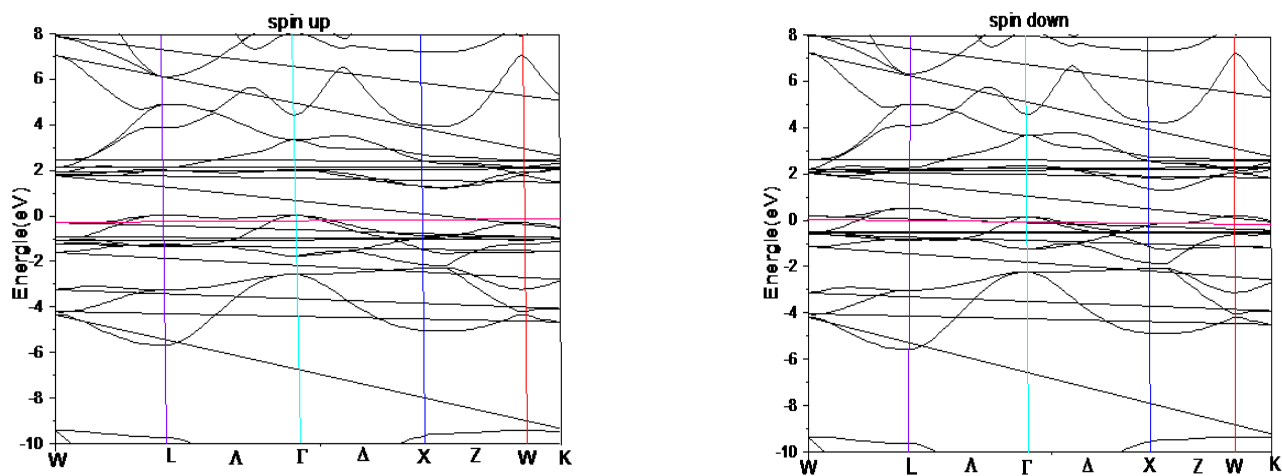


Figure III.9: structure des bandes FeVSb (up et down) par le cadre LDA+U.

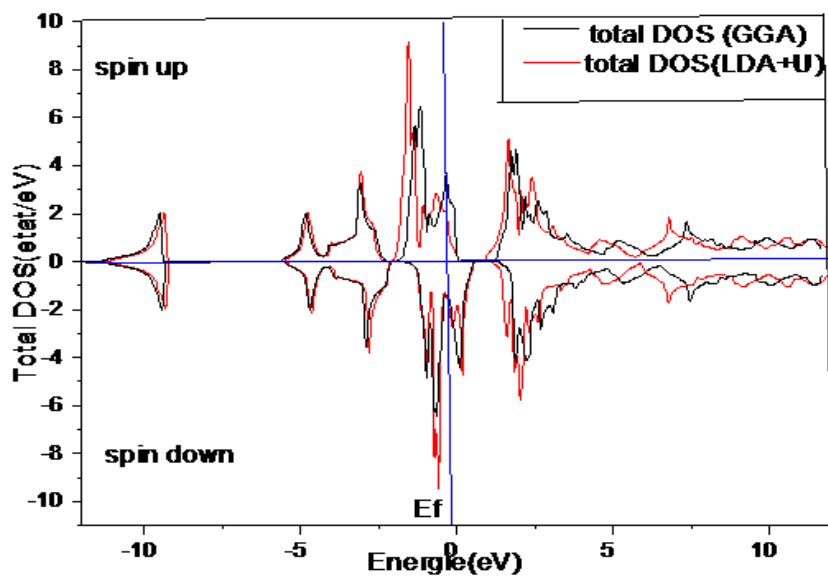


Figure III.10 : d'états totales (TDOS) par le cadre LDA+U et GGA De composé FeTiSb.

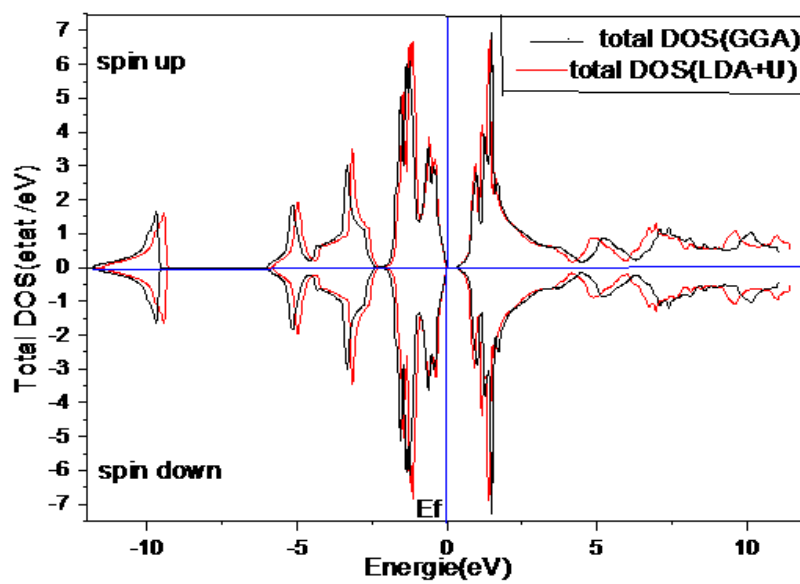


Figure III.11 : Densité d'états totales (TDOS) par le cadre LDA+U et GGA De composé FeVSb.

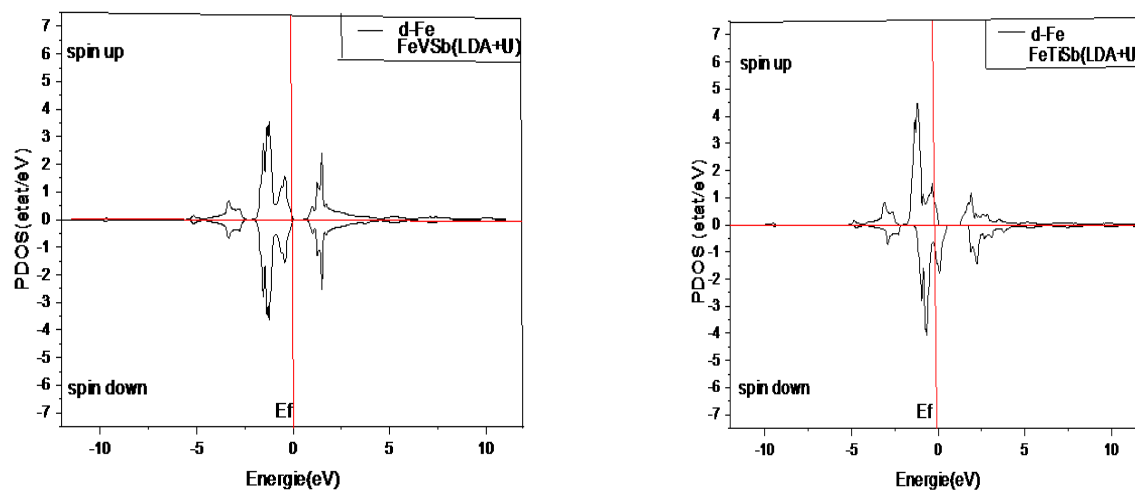


Figure III.12 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Fe) par le cadre LDA+U.

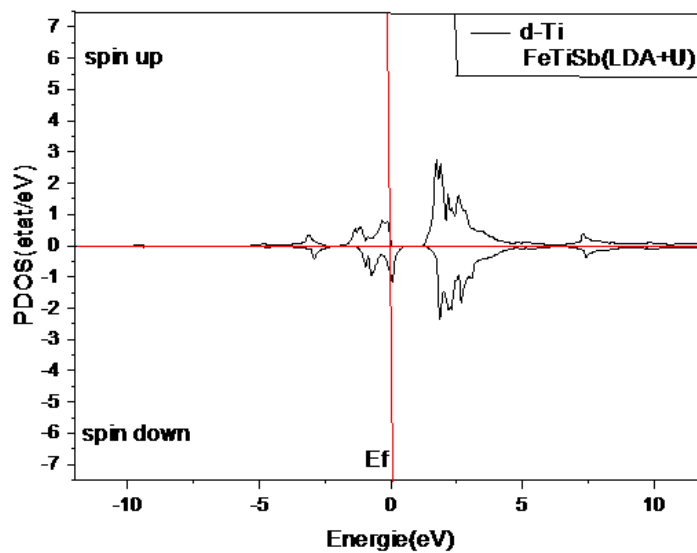


Figure III.13 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Ti) par le cadre LDA+U De composé FeTiSb.

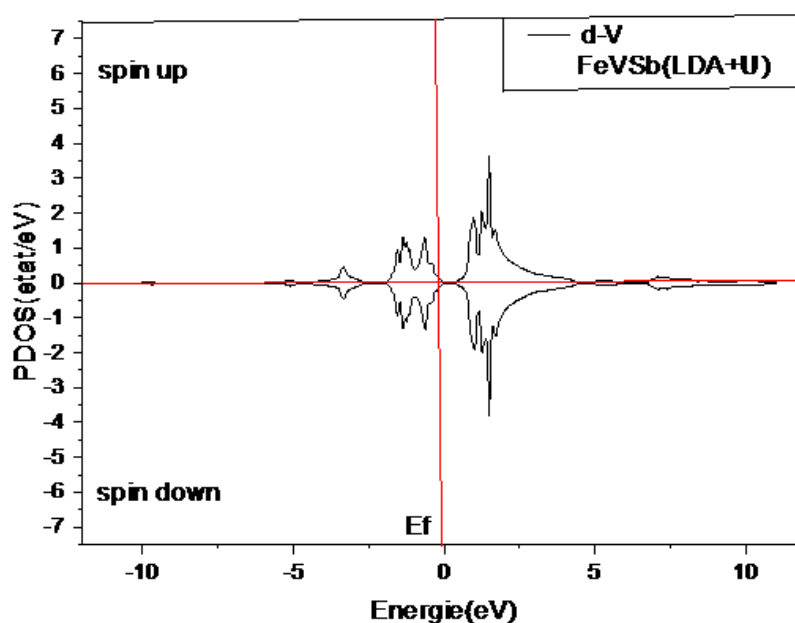


Figure III.14 : Densité d'états partiel (PDOS) (-d-Ti) par le cadre LDA+U De composé FeVSb.

III.2.4. Les propriétés élastiques à une pression nulle :

Nous avons commencé avec l'état monocristallin ; les constantes élastiques fournissent des informations importantes sur l'anisotropie des liaisons interatomiques et de la stabilité structurale. Les valeurs de l'élastique constantes obtenues dans ce travail par calcul LDA + U à une pression nulle sont énumérées dans le tableau III.9 On note que nos constants élastiques calculés satisfont le critère de stabilité [10]:

$$(C_{11} - C_{12}) > 0 ; (C_{11} + 2C_{12}) > 0 ; C_{11} > 0 ; C_{44} > 0 ; C_{12} < B < C_{11} , \quad (\text{III-5})$$

ce qui indique clairement la stabilité de ces composés. Les alliages étudiés sont caractérisés par valeur C_{11} grande par rapport à C_{12} et C_{44} . Ce qui signifie que ces matériaux sont plus résistants à compression unidirectionnelle de la déformation de cisaillement, et les valeurs élevées de la constante élastique C_{11} reflète la force de la liaison Ti(V) –Sb suivant les directions principales [100], [010] et [001]. Nous ont également calculé C' , qui représente la résistance à la déformation de cisaillement à travers le plan(110), à l'aide de l'expression suivante:

$$C' = (C_{11} - C_{12})/2 , \quad (\text{III-6})$$

Un autre paramètre important est le facteur d'élasticité anisotrope, ce qui donne une mesure de l'anisotropie de la vitesse de l'onde élastique dans un cristal et elle est donnée comme suit [11]:

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = \frac{C_{44}}{C'}, \quad (\text{III-7})$$

Tableau III.9: les constants élastiques (GPA), module de cisaillement (le GPA) et le facteur anisotrope d'Alliages de FeTiSb et FeVSb.

| Matériaux | C_{11} | C_{12} | C_{44} | C' | A |
|-----------|----------|----------|----------|---------|-------|
| FeTiSb | 261,330 | 100,064 | 42,776 | 80,633 | 0,530 |
| FeVSb | 353,833 | 114,423 | 66,089 | 119,705 | 0,552 |

Le calcul des constantes élastiques C_{ij} , Nous permettra d'évaluer les vitesses des ondes élastiques des matériaux étudiés suivant les directions principales [100], [110] et [111] de la maille, Ces paramètres sont donnés par la résolution de l'équation de Christoffel [12]

$$(C_{ijkl}n_jn_k - \rho v^2 \delta_{il})u_l = 0, \quad (\text{III-8})$$

Où C_{ijkl} est le tenseur des constantes élastiques, ρ est la densité de la matière, n est la direction de l'onde propagation, u est la polarisation de l'onde et v est la vitesse de l'onde. Les solutions de ce l'équation sont de deux types: d'une vitesse longitudinale avec une polarisation parallèle à la propagation direction (v_l) et deux vitesses transversales (v_{t_1} et v_{t_2}) ayant une polarisation perpendiculaire à n . Pour un système cubique, les vitesses des ondes qui se propagent le long des principales directions [100], [110] et [111] sont données comme suit:

$$v_l^{100} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}; v_{t_1}^{100} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}, \quad (\text{III-9})$$

$$v_l^{110} = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}}; v_{t_1}^{110} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}; v_{t_2}^{110} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}}, \quad (\text{III-10})$$

$$v_l^{111} = \sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}}; v_{t_1}^{111} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}}, \quad (\text{III-11})$$

Tableau III.10: Les valeurs obtenues des vitesses de propagation des ondes (m/s).

| Matériau | ρ | v_l^{100} | v_t^{100} | v_l^{110} | v_t^{110} | v_t^{110} | v_l^{111} | v_t^{111} |
|----------|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| FeTiSb | 7,571 | 5875 | 2377 | 5433 | 2377 | 3263 | 5277 | 2977 |
| FeVSb | 8,225 | 6559 | 2835 | 6042 | 2835 | 3815 | 7176 | 3519 |

D'autre part, Les constantes élastiques sont liées aux paramètres macroscopiques comme les modules de cisaillement G_H et de Young (E) ainsi que le coefficient de Poisson (σ). En général, les propriétés élastiques d'un solide sont très importantes pour la compréhension du comportement mécanique du cristal. Le module de Young (E) qui exprime la rigidité du matériau (exprime la force de liaisons atomique). Pour une structure cubique, il est exprimé par la relation suivante [13,14] :

$$E = \frac{9BG_H}{3B+G_H}; \sigma = \frac{3B-2G_H}{2(3B+G_H)} \quad (\text{III-12})$$

Pour un système cubique le module en défini B : module de compressibilité, mesure la résistance à une modification du volume dans les solides :

$$B = \frac{C_{11}+2C_{12}}{3}, \quad (\text{III-13})$$

Pour des cristaux cubiques, il est lié aux constantes élastiques selon l'approximation de Voigt- Reuss- Hill [15] par les relations suivantes:

$$G_V = \frac{C_{11}-C_{12}+3C_{44}}{5}; \quad G_R = \frac{5C_{44}(C_{11}-C_{12})}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})}; \quad G_H = \frac{G_V+G_R}{2}, \quad (\text{III-14})$$

d'où G_V est le module de cisaillement de Voigt [16] correspondant à la limite supérieure des valeurs G_H et G_R est le module de cisaillement de Reuss [17] pour les cristaux cubiques correspondant aux valeurs plus faibles.

Cependant, Il est noté que les modules de compressibilités B et cisaillement G_H permettent la description de la résistance mécanique.

L'anisotropie élastique d'un cristal cubique est mesurée par la variation entre les modules à travers le facteur d'anisotropie A_G [18] :

$$A_G = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R}, \quad (\text{III-15})$$

La ductilité : indique le degré de la déformation plastique qu'un matériau peut supporter avant la rupture (résistance à la rupture). Le comportement Ductile/ Fragile de ces matériaux peut être prédit. Selon le critère de Pugh [19] un matériau est ductile si le rapport B/G est supérieur à 1.75 à condition que leur température de fusion soit supérieure à 900 ° C. Cette valeur à été établie aussi pour séparer le domaine de la rigidité de celui de la ductilité [20], ainsi il peut être considéré comme une mesure de la ductilité/Fragilité des solides [21]. A l'origine, le coefficient de Pugh a été calculé dans le cadre de l'étude des métaux simples et des alliages métalliques.

Tableau III.11: Le module de compressibilité B (GPA), les modules

(G_V, G_R et G_H)(GPA), le module d'Young E (GPA), le facteur anisotrope A_G , le coefficient de poissons et le rapport B/G_H .

| alliage | B | G_V | G_R | G_H | E | σ | A_G | B/G_H |
|---------|---------|--------|--------|--------|---------|----------|-------|---------|
| FeTiSb | 153,819 | 57,918 | 52,666 | 52,292 | 148,127 | 0,339 | 0,047 | 2,781 |
| FeVSb | 194,226 | 87,535 | 80,513 | 84,024 | 220,303 | 0,310 | 0,041 | 2,311 |

A partir des constantes élastiques calculées, nous avons calculé la température de Debye θ_D qui est un paramètre fondamentalement important lié à des nombreuses propriétés physiques telles que la chaleur spécifique et la température de fusion. Dans le cas présent, la température de Debye θ_D est déterminée en utilisant la moyenne des vitesses du son v_m , selon la relation suivante [22] :

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi V} \right]^{\frac{1}{3}} v_m, \quad (\text{III-16})$$

où h est la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmaan, n le nombre d'atomes, V volume demaille élémentaire, v_m La vitesse moyenne du son

La vitesse moyenne du son v_m est donnée par la relation suivante [23]:

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (\text{III-17})$$

Après avoir calculé le module de compressibilité B , et le module de cisaillement G_H , nous pouvons facilement calculer les vitesses de propagation des ondes transversale v_t et v_l cela selon les équations de Navier [24] :

$$v_l = \sqrt{\frac{3B+4G_H}{3\rho}}; v_t = \sqrt{\frac{G_H}{\rho}} \quad (\text{III-18})$$

Tableau III.12: V Longitudinal calculé (m/s), v transversale (m/s), atteint en moyenne des vitesse de vague élastiques v(m/s) et Debye Température θ_D (k).

| matériaux | v_l | v_t | v_m | θ_D |
|-----------|-------|-------|-------|------------|
| FeTiSb | 5482 | 2702 | 3034 | 355 |
| FeVSb | 6102 | 3196 | 3575 | 428 |

Références:

- [1] O.K. Anderson, Phys. Rev B 42 (1975) 3060.
- [2] S. Cottenier, DFT and the family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction, K.U. Leuven (http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks), (2002).
- [3] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Vienna, Austria (2008).
- [4] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865.
- [5] R. Marazza, D. Rossi, R. Ferro, Journal of the Less-Common Metals 138 (1988) 189-193.
- [6] F. D. Murnaghan, Proc. Natl Acad. Sci. USA 1944; 30: 244.
- [7] J.C. Slater, Phys. Rev. 49 (1936) 931–937.
- [8] L. Pauling, Phys. Rev. 54 (1938) 899–904.
- [9] M. Born, Proc. Cambridge Philos. Soc. 36 (1939) 160-172.
- [10] B.B. Karki, G.J. Ackland, J. Crain, J. Phys: Condens. Matter. 9 (1997) 8579.
- [11] E.B. Christoffel, Annali di Matematica. 8 (1877) 193–243.
- [12] B. Mayer, H. Anton, E. Bott, M. Methfessel, J. Sticht and P.C. Schmidt, Intermetallics 2003; 11:23-32.
- [13] R. Hill. Proc. Phys. Soc. London A 1952; 65: 349.
- [14] R. Hill. Proc. Phys. Soc. London A 1952; 65: 349.
- [15] W. Voigt. Lehrbuch der Kristallphysik Teubner, Leipzig (1928) pp 313 315.
- [16] A. Reuss, Angew. A Math. Mech 1929; 9: 49.
- [17] J.R. Morris, Y. Ye, Y.B. Lee, B.N. Harmon, K.A. Gschneidner, A.M. Russell, Acta Mater. 52 (2004) 4849.
- [18] S.F. Pugh. Philos Mag 45 1954; 45: 823 843.
- [19] L. G. Hector, J. F. Herbst, “Electronic and elastic properties of RCo₅ and RCo₅H_n (R = La, Ce, Pr)”, Journal of Alloys and Compounds, 379, 41, 2004.

- [20] L. Vitos, P. A. Korzhavyi, and B. Johansson. Elastic Property Maps of Austenitic Stainless Steels. *Phys. Rev Lett.*(2002).
- [21] O. L. Anderson. *J. Phys. Chem. Solids*1963; 24: 909.
- [22] S. Ganeshan, S. L. Shang, H. Zhang, , Y. Wang, , M. Mantina& Z. K. Liu, *Intermetallics*. 17(2009) 313-318.
- [23] E. Schreibe, O.L. Anderson, N. Soga, *Elastic Constants and their Measurements*, McGraw-Hill, New York 1973.

Conclusion générale

Conclusion générale:

Notre travail a visé à établir une image plus claire de deux composés de la famille d'alliage demi-Heusler: le FeTiSb et le FeVSb.

L'outil employé pour effectuer cette étude est la méthode des ondes planes augmentées linéaires (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le potentiel d'échange-corrélation est traité par l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation de densité de spin avec le potentiel de coulomb(LSDA+U) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

- Les propriétés structurales telles que le paramètre de maille optimisé, sont en bon accord avec les données expérimentales. La LDA et LDA+U diminuent le paramètre de maille, par contre la GGA elle surestime ce dernier.
- Et nous avons fait les schémas de bandes et les densités d'états (DOS et PDOS) de chaque alliage et on résulte que ces alliages ont un caractère d'un métal.
- L'étude des propriétés élastiques Les deux composés ont un caractère ductile

Abstract:

We have performed a theoretical study using the density functional theory (DFT) based on the full potential linearized augmented plane wave approach (FP-LAPW) to determine the structural magnetic, electronic and elastic properties of FeTiSb and FeVSb compounds. The exchange-correlation potential used are: the local density approximation (LDA) and the local spin density approximation with Coulomb potential (LDA+U) and generalized gradient approximation (GGA). The calculated structural properties such as the equilibrium lattice constant are in good agreement with the available data. The obtained magnetic moments are not in agreement with Slater-Pauling rule. The obtained results of electronic properties show that, these alloys do not exhibit the half-metallicity. The calculation of elastic properties indicates that these materials have a ductile behavior.

Key-words: Spintronic; Heusler alloys; Half-metal; Slater-Pauling rule; density functional theory.

Résumé:

Dans ce travail, théorie de la fonctionnelle de la densité basée sur La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est utilisée pour étudier les propriétés structurales, magnétiques, électroniques et élastiques des alliages demi-Heusler FeTiSb et FeVSb. Il est indiqué que le moment magnétique de ces deux composés n'est pas en accord avec la règle de Slater-Pauling, ces alliages ne présentent pas la demi-métallicité et ils sont des matériaux ductiles.

Mots-clés : Spintronique ; les alliages d'Heusler ; Demi-métal ; Théorie de la fonctionnelle de la densité

ملخص:

في هذا العمل المتواضع و المنجز، يتضح لنا أن نظرية الكثافة الوظيفية تعتمد أساسا على طريقة تقريب الأمواج المستوية والمتزايدة خطيا (FP-LAPW) وتستخدم من أجل دراسة الخصائص البنيوية، المغناطيسية، الإلكترونية والمطاطية (المرنية) لخلائط النصف هسليرية FeTiSb و FeVSb.

كما يشار أن العزم المغناطيسي لهذين المركبين لا يتفق مع قاعدة سلتر- بولينغ على الإطلاق. وعليه فإن هذه الخلائط لا تمثل الخصائص النصف معدنية ولكنها مواد لينة.

الكلمات الرئيسية: الإلكترونات الدورانية، خلائط النصف هسليرية، النصف معدن، نظرية الكثافة الوظيفية.