

Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique

Département de Physique.

Filière : Physique.

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'Obtention du Diplôme de Master en Physique.

Option : **Physique des matériaux.**

Présenté par :

BENOUDA HANANE

THEME :

CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PROPRIETES PHYSIQUES

DE L'ALLIAGE DEMI-HEUSLER $FeVS_n$ A L'AIDE D'UN CALCUL AB-INITIO

Soutenu le : 03/07/2021

Devant le jury composé de :

ABBASSA Hamza	MCA	Université de Mostaganem	Président
BELBACHIR Souheil	MCB	Université de Mostaganem	Examineur
BENCHEHIDA Belkacem	MAA	Université de Mostaganem	Encadreur

Année Universitaire 2020-2021

RESUME

La physique des matériaux porte un intérêt particulier aux alliages Heuslers, et ce, pour les applications dans le domaine spintronique, depuis leur apparition, les physiciens n'ont cessé d'approfondir la recherche pour ce type de matériau.

Ces matériaux sont classés en trois catégories, les half-Heusler, les full-Heusler et les Heusler quaternaires. Ce classement est dû en particulier à leurs structures cristallographiques et leurs propriétés magnétiques

Dans ce mémoire, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du matériau Half-Heusler FeVSn, utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et s'appuyant sur la méthode FP-LAPW, intégrée dans le code Wien2k,

Les résultats obtenus sont satisfaisants et concordent assez bien avec d'autres études théoriques et expérimentales.

ABSTRACT

The physics of materials is of particular interest to Heusler alloys, for applications in the spintronics field, , physicists have continued to deepen research for this type of material.

These materials are classified into three categories, Half-Heusler, Full-Heusler and Quaternary Heusler. This classification is due in particular to their crystallographic structures and their magnetic properties.

In this thesis, we are interested in the study of the structural, electronic and magnetic properties of the Half-Heusler FeVSn material, using the density functional theory (DFT) and relying on the FP-LAPW method, integrated in the Wien2k code,

The results obtained are satisfactory and agree quite well with other theoretical and experimental studies

ملخص

تولي فيزياء المادة اهتمام خاص وكبير لسبائك heusler خصوصا في مجال الالكترونيات السفلية منذ ظهورها. بحيث واصل الفيزيائيون تعميق البحث عن هذا النوع من المواد

لقد تم تصنيف هذه المواد إلى ثلاث فئات، Heusler-Half و Heusler-Full و Quaternary Heusler. هذا التصنيف يرجع بشكل خاص إلى هياكلها البلورية وخصائصها المغناطيسي

في هذه الرسالة، نهتم بدراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية والمغناطيسية لمادة Heusler FeVSn-Half، باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) والاعتماد على طريقة LAPW-FP المدمجة في كود Wien2k،

النتائج التي تم الحصول عليها مرضية وتتفق بشكل جيد مع الدراسات النظرية والتجريبية الأخرى.

DEDI C A C E :

Je dédie ce travail :

- ◆ A mon père pour tous ce qu'il m'a donné
- ◆ A ma mère pour tous ses sacrifices.
- ◆ A mes frères et sœurs.
- ◆ A toute la famille
- ◆ A tous mes amies sans exception
- ◆ A Mon enseignant **BENCHEHIDA BELACEM**
- ◆ A Tous mes enseignants
- ◆ A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à concrétiser ce travail.

REMERCIEMENTS :

Je remercie à tout instant mon dieu (Allah) qui m'a donné de l'espoir et de l'énergie pour finir ce modeste travail.

Je souhaiterais dans un premier temps exprimer mes remerciements les plus Profonds envers mon encadreur Monsieur BENCHEHIDA BELACEM pour son soutien, son aide et ses conseils pour la réalisation de ce travail, il mérite vraiment beaucoup de remerciements

Mes remerciements aux membres du jury : M^r ABBASSA Hamza et M^r BELBACHIR Souheil qui ont accepté d'évaluer ce modeste travail,

Je voudrais remercier aussi sans exception toute personne ayant contribué à la réalisation de ce travail.

Enfin, j'adresse mes sincères remerciements à mes parents, mes amies et mes camarades pour le soutien et l'encouragement pour l'aboutissement de mon travail de fin d'études.

LISTE DES ABREVIATIONS:

DFT :	Théorie de la fonctionnelle de la densité
GGA :	Approximation du gradient généralisée
FALAPW :	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total
NM :	Non-magnétique
FM :	Ferrimagnétique
a :	Paramètre de maille
μ :	Le moment magnétique
DOS :	Densité d'états
P :	Polarisation.
B :	Module de compressibilité

SOMMAIRE :

Dédicace.....	I
Remerciements	II
Liste des abréviations.....	III
Liste des figures	IV
Liste des tableaux	V
Introduction Générale	1
Références.....	3

Chapitre I : Magnétisme , alliage Heusler et semi-Heusler

I.1. Introduction.....	5
I.2.spintronique.....	5
I.2.1.Principe de la spintronique	6
I.2.2. L'intérêt de la spintronique.....	6
I.3. Magnétisme et matériaux magnétiques.....	7
I.3.1. Origines du magnétisme.....	7
I.3.2. Comportements magnétiques des matériaux.....	8
I.3.2. Matériaux Diamagnétiques (DM)	9
I.3.3. Matériaux Paramagnétiques (PM).....	10
I.3.4. Matériaux Ferromagnétiques (FM).....	11
I.3.5. Matériaux Ferrimagnétiques (FIM).....	12
I.3.7.Matériaux Antiferromagnétiques (AFM)	13
I.4.alliages Heusler.....	13
I.4.1. Les alliages demi-Heusler	14
I.4.1.1. structure cristalline Les alliages demi-Heusler (Half-Heusler).....	15
I.4.2.Les alliages Heusler (Full-Heusler)	15
I.4.2.1.Structure cristalline des alliages Heusler (Full-Heusler)	16
I.4.3.Autre famille pour les alliages Heusler	18
I.5.Classification du matériau Half-Heusler FeVSn.....	18
I.6. Conclusion	19
Références chapitre I.....	20

Chapitre II : Méthodes de calcul

II.1.Introduction.....	23
II.2.Equation de Schrödinger.....	23

II .3.Approximation de Born Oppenheimer.....	25
II.4.Les méthodes ab- initio	26
II.5.Approche de Hartree-Fock.....	26
II.6Théorie de la fonctionnelle de la densité.....	27
II.7.l'approche de Kohn et Sham.....	27
II.8.L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	29
II.9.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées(LAPW)	29
II.10.Le Code Wien2k	30
II.11. Conclusion.....	30
Références chapitre II.....	31

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1.Introduction.....	34
III.2.Présentation du FeVSn	34
III.3.Méthodes de calcul utilisée	35
III.4.Propriétés structurales et optimisation	39
III.5.Propriétés électroniques	42
III.6.Propriétés magnétiques	44
III.7.Conclusion générale	47
Références chapitre III.....	49

LISTE DES FIGURES

Figure I.1 :	la direction des aimants	7
Figure I.2 :	Moment magnétique	8
Figure I.3 :	Comportement magnétique des matériaux, effet de l'orientation du moment	9
Figure I.4 :	(a) les variations de l'aimantation sous l'effet du champ magnétique, (b) et la variation thermique de la susceptibilité magnétique pour une substance diamagnétique	10
Figure I.5 :	(a) paramagnétisme un réseau de spins, (b) variation d'aimantation sous champ appliqué, (c) variation thermique de $\frac{1}{\chi}$	11
Figure I.6 :	(a) : Un réseau de spins, (b) : variation sous l'effet du champ d'aimantation ($T_i < T_e < T < T_s$), (c) : variation thermique de $\frac{1}{\chi}$, (d) : variation thermique de aimantation spontanée .	12
Figure I.7 :	(a) un réseau de spins, (b) variation de l'aimantation sous champ appliqué, (c) variation thermique de $\frac{1}{\chi}$, (d) variation thermique de l'aimantation spontanée	12
Figure I.8 :	: (a) : un réseau de spins, (b) : variation de l'aimantation sous champ appliqué, (c) : variation thermique de $\frac{1}{\chi}$	13
Figure I.9 :	Tableau périodique des éléments. Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert.	14

	Un grand nombre d'alliages Heusler est possible d'être formé par la combinaison des différents éléments indiqués au tableau	
Figure I.10 :	Structure de demi-Heusler (Half-Heusler)	15
Figure I.11 :	Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler) : a) régulière ; b) inverse	16
Figure I.12 :	Les différents types de désordre pouvant survenir dans la structure (half/full) Heusler: (a) désordre de type Cu_2MnAl , (b) désordre de type CsCl, (c) désordre de type CaF_2 , (d) désordre de type BF_3 , (e) désordre de type NaTl et (f) désordre de type tungstène.	17
Figure I 13 :	structure d'Heusler quaternaire	18
Figure III .1 :	Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères A et B de rayons muffin-tin R_A et R_B respectivement	36
Figure.III .2 :	représente l'organigramme d'un calcul auto-cohérent utilisant la méthode de la théorie de fonctionnelle de la densité électronique (DFT)	38
Figure.III.3 :	représente les courbes d'optimisation de l'énergie totale en fonction du volume pour les cubiques (NM) et (FM)	41
Figure.III .4 :	représente la densité totale (TDOS) et partielle(PDOS) des spins minoritaires et les spins majoritaires du composé FeVSn dans la phase cubique Ferromagnétique.	44
Figure.III.5 :	La structure de bande du composé FeVSn dans le cas de spin(dn)	45
Figure.III.6 :	structure de bande pour le matériau FeVSn dans le cas de spin-up	46

LISTE DES TABLEAUX :

- Tableau I.1 :** Différents types d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type C1b.
- Tableau I.2 :** les positions, le nombre atomique et R_{MT} des éléments composant FeVSn.
- Tableau III.1 :** Energie d'équilibre E_0 , volume V_0 à l'équilibre, paramètre de maille a_0 , module de compression B et sa dérivée B' .
- Tableau III.2 :** Représente les moments magnétiques totaux et partiels du composé FeVSn dans la phase cubique magnétique.

INTRODUCTION

GENERALE

Introduction Générale :

De nos jours, il existe de nombreux développements qui nécessitent l'utilisation de nouveaux matériaux, avec de bonnes caractéristiques pour le développement industriel. La découverte des alliages Heusler et demi-Heusler a ouvert la voie aux chercheurs pour élaborer un nouveau genre de matériau . Ce travail, est consacré à l'étude des propriétés physiques du matériau demi- Heusler FeVSn.

Avant d'employer les matériaux (solides) dans l'industrie, il faut s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques, mécaniques, magnétique...etc. Pour étudier ces matériaux, les théoriciens ont développé des méthodes et un grand nombre d'approches classiques, empiriques, semi- empiriques ou ab-initio. Cependant, si le but est de déterminer les propriétés électroniques et optiques, le cristal ne doit pas être décrit par un simple système d'atomes, mais il s'avère indispensable de tenir compte des interactions électrons-électrons, électrons-noyau et ainsi, traiter un système à N électrons en interaction.

Toute la difficulté réside dans le fait qu'un tel système ne peut être décrit par les lois classiques de Newton, mais il est régi par la mécanique quantique, autrement dit par l'équation de Schrödinger. La découverte des Alliages Heusler, est une catégorie d'alliages qui comprend plus de 1000 composés. Les chercheurs, portent un intérêt particulier à la connaissance de leurs propriétés en utilisant la mécanique quantique.

Les alliages Heusler sont connus depuis plus de 100 ans. Ils portent le nom de l'Allemand Friedrich Heusler, un ingénieur des mines et chimiste, qui a découvert en 1903 que CuMnAl était ferromagnétique, bien que l'alliage soit constitué d'éléments non ferromagnétiques. Aujourd'hui, deux classes de matériaux se distinguent : les alliages Heusler et les alliages Semi-Heusler ou Half-Heusler (HH) de formule générale XYZ et les alliages Heusler complets ou Full-Heusler (FH) avec la formule X_2YZ . Les éléments X et Y proviennent du groupe de métal de transition, tandis que le composant Z est l'élément du groupe III-V. Les alliages Half-Heusler ou Full-Heusler sont caractérisés respectivement par les structures C1b et L21. [1]

Dans ce travail, on a obtenu les résultats par la méthode ab-initio avec le code Wien2k, qui repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la DFT à partir de la méthode des ondes planes augmentées (LAPW) intégrée dans le code Wien2k.

L'objectif de ce travail est une contribution par une étude par simulation pour déterminer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de l'alliage FeVSn. La formule générale de cette famille est XYZ, X et Y sont des métaux de transition et Z un élément de la colonne III, IV ou V du tableau périodique des éléments Ce sont des composés demi- Heusler .Les propriétés de ces alliages ont un intérêt pour les applications spintronique

Ce travail est devisé en trois chapitres :

le chapitre I contient des informations générales sur la famille d'alliage Heusler et Half-Heusler en particulier le FeVSn. Suivi d'une présentation des origines du magnétisme et description des différents comportements magnétiques.

Dans le chapitre II, on a présenté la méthode théorique utilisée. C'est une méthode quantique implanté dans le code de nos calculs, ainsi que les approximations de base et l'évolution de la méthode, nous avons exposé la méthode qui utilise le formalisme de la DFT pour traiter le potentiel, c'est la méthode FP- LAPW.

Le chapitre III a été consacré aux résultats et discussions concernant le composé FeVSn, on a comparé les résultats calculés avec des résultats théoriques, éventuellement avec des résultats trouvés par d'autres méthodes,

Références:

[1]: Tiaiba Khadra, Etude de quelques propriétés physiques des alliages quaternaires d' Heusler, Université Mohamed Boudiaf -m'sila, , mémoire de master , 2019/2020 .

[2] : H. Tuzcuoglu. Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co_2FeAl . Physique [physics]. Université Paris 13, 2014. Français.

CHAPITRE I

Magnétisme,

Alliage Heusler

et semi-Heusler

I.1.Introduction :

Connu depuis des milliers d'années, le magnétisme, est un phénomène par lequel les matériaux affirment une force ou une influence attractive ou répulsive sur d'autres matériaux. Cependant, les principes et mécanismes sous-jacents qui expliquent le phénomène magnétique sont complexes et subtils, et leur compréhension a échappé aux scientifiques Jusqu'à des temps relativement récents.

Le magnétisme est le domaine de la physique où on étudie les propriétés magnétiques, dues aux moments magnétiques des particules qui constituent la matière. Les propriétés magnétiques des solides sont variées et sont intéressantes pour les applications fondamentales. Pour la plupart des applications, une magnétisation spontanée telle que fournie par Ferromagnétique ou ferrimagnétisme est nécessaire. Plusieurs de nos dispositifs technologiques modernes s'appuient sur le magnétisme et les matériaux magnétiques, notamment au niveau industriel : alternateurs, transformateurs (indispensables à la production et au transport de l'électricité), machines de toutes sortes, capteurs,... au niveau du transport : tous les moteurs électriques automobile, trains, avions,... au niveau ménager : réfrigérateurs, tables chauffantes à induction,... au niveau de l'horlogerie : montres à aiguilles non mécaniques,... au niveau informatique : enregistrement magnétique des ordinateurs au niveau de la santé : imagerie par résonance magnétique, ...[1]

I.2.La spintronique

Inspirer des travaux réalisés sur la magnétorésistance à la fin des années 80. Actuellement, la recherche se penche principalement sur les propriétés quantiques en particulier celle du « spin »,

Le spin \vec{S} est une propriété quantique de l'électron ne possédant pas d'équivalent classique, il est quantifié et ne peut prendre que les valeurs $+$ et $\frac{-1}{2}$ suivant l'axe de quantification. Une particule possédant un spin se comporte comme un minuscule aimant dont les pôles peuvent basculer de haut (spin up) vers le bas (spin down dn)

I.2.1. principe de la spintronique

L'idée de base est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'exploiter l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ce matériaux, cette influence fut suggérée par Mott [2] en 1936 , démontrer expérimentalement et d'une manière formelle à la fin des années 60 [3] –[4]

I.2.2.L'intérêt de la spintronique

L'électronique de spin consiste à faire passer un courant d'électrons à travers des couches ultrafines de matériaux ferromagnétiques, c'est comme le fer. Il existe dans ces couches une forte interaction entre le spin de l'électron et l'aimantation du métal ferromagnétique. Une couche dont l'aimantation est dirigée vers le haut, peut laisser passer facilement le courant d'électrons dont le spin est également orienté vers le haut et stoppe ou presque les électrons de direction de spin opposée. Grâce a cet effet de filtre à spin, on peut ainsi contrôler une orientation de spin, d'où l'intérêt de la création d'un courant d'électrons.

La spintronique est une nouvelle technique qui s'appuie sur les propriétés des particules quantiques dites spin. Elle est issue des travaux sur la magnétorésistance dite géante (GMR), menés à partir de la fin de la décennie 1980 et ayant conduit aux découvertes qui ont permis aux français Albert Fert de l'université Paris Sud et à l'allemand Peter Grünberg de Centre de Recherche Jülich [5] -[6] d'obtenir le Prix Nobel 2007. Le spin est une propriété quantique de l'électron qui, d'une manière imagée est décrite comme tournant sur elle-même de même qu'une toupie. Dans le monde quantique, cette rotation ne produit pas un mouvement physique (moment cinétique) mais un mouvement magnétique. Une particule possédant un spin se comporte comme un minuscule aimant, dont les pôles peuvent basculer du haut (spin up) vers le bas (spin down) et réciproquement, lorsque l'on applique un champ magnétique approprié, fut-il très faible

I.3. Magnétisme et matériaux magnétiques :

Au Moyen âge, la "pierre d'aimant" venait d'une région de la Grèce, nommée Magnésie. Cette "pierre d'aimant" contenait de la magnétite (Fe_3O_4), qui est un aimant naturel permanent. Par ce nom vint les origines du mot magnétisme. On connaissait l'électrostatique, le courant électrique et les phénomènes magnétiques. On pensait bien que l'électrostatique et le courant électrique étaient liés, car tous les deux pouvaient provoquer des chocs électriques. Mais il ne semblait rien avoir en commun entre les phénomènes magnétiques et l'électricité.

I.3.1. Origines du magnétisme :

On avait observé que des aimants pouvaient s'attirer et se repousser, et qu'une aiguille aimantée posée sur de l'eau, se dirigeait selon la direction nord – sud. Donc la Terre agit comme un aimant. On décida de nommer "nord" le côté de l'aimant attiré par le pôle nord et "sud" le côté attiré par le pôle sud. On avait observé que les côtés nord se repoussent, ainsi que les côtés sud, et qu'un côté nord attirait un côté sud. Ceci permit la découverte de la boussole, mais jusqu'en 1819, c'est à peu près la seule chose que l'on connaissait du magnétisme.

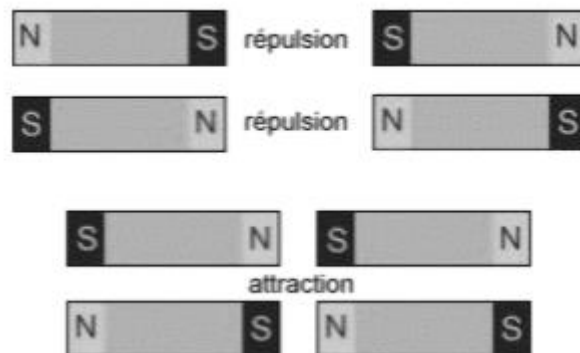


Figure .I .1 : la direction des aimants

Durant l'hiver 1819, le Danois Hans Christian Oersted découvrit qu'un courant électrique déviait l'aiguille d'une boussole. Cette découverte déclencha de nombreuses autres expériences sur le magnétisme, dont la description fut rapidement donnée par André-Marie Ampère, Michael Faraday et quelques

autres physiciens de l'époque. Douze années plus tard, Faraday mis en évidence l'induction électromagnétique, à l'origine des turbines, générateurs de courant électrique et des moteurs électriques. En 1864, James Clerk Maxwell donna une formulation mathématique complète de l'électromagnétisme, qui connut une triomphale vérification quand Heinrich Rudolf Hertz mit en évidence, en 1888, les ondes électromagnétiques. Rapidement, quelques physiciens s'aperçurent que la toute nouvelle théorie de Maxwell était en contradiction avec la vieille théorie de Newton sur la mécanique classique. Ce conflit amena Albert Einstein à publier en 1905 un article s'intitulant "Sur l'électrodynamique des corps en mouvement", qui est l'origine de la théorie de la relativité.[7 ,8]

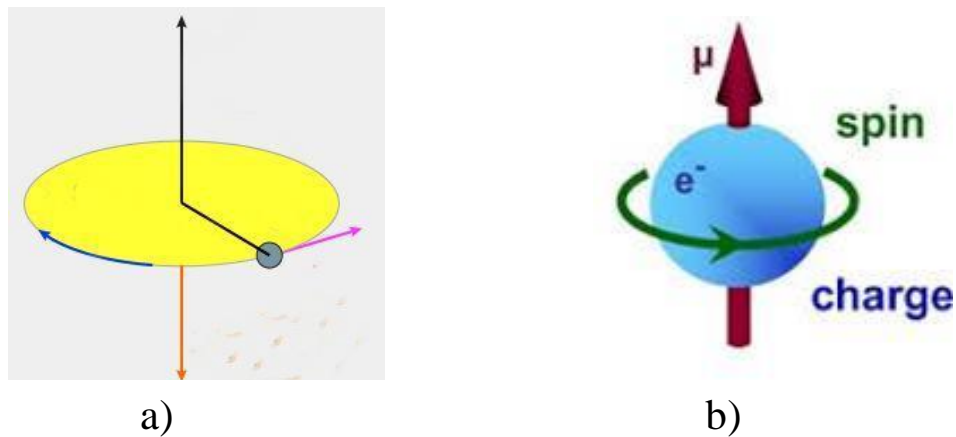


Figure. I.2 : a) Moment magnétique orbital, b) moment magnétique du spin

I.3.2.Comportement magnétiques des matériaux :

Le mouvement orbital et de rotation des électrons et l'interaction entre ces électrons est à l'origine du magnétisme. Différents types de matériaux magnétiques sont dus à la différence de leur réponse aux champs magnétiques externes. Certains matériaux sont beaucoup plus magnétiques que d'autres. La raison en est que, dans certains matériaux, il existe une forte interaction entre les aimants atomiques, où, comme dans d'autres matériaux, il n'y a pas d'interaction entre les aimants atomiques. L'orientation de moment, M et la susceptibilité χ dépend du comportement magnétique des matériaux (Figure .I.3) [9]

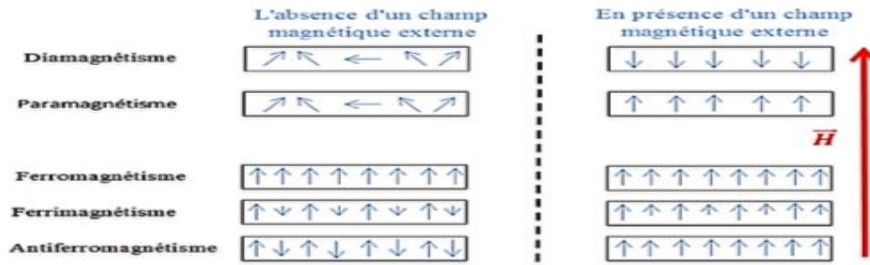


Figure I. 3. Comportement magnétique des matériaux, effet de l'orientation du moment.

Ce comportement magnétique des matériaux peut être classé dans les cinq principaux groupes suivants :

I.3.3. Matériaux Diamagnétiques (DM) :

Matériaux diamagnétiques sont des matériaux caractérisés par l'absence de moment magnétique en l'absence d'un champ magnétique

Le phénomène du diamagnétisme se manifeste lors de l'application d'un champ magnétique externe sur un matériau, des expériences ont montré que les électrons s'orientent dans le sens opposé du champ appliqué, il se produit un effet de répulsion entre l'aimant et le matériau, cette répulsion ne se produit pas de manière intrinsèque, elle est produite par la présence de l'aimant et disparaît quand ce dernier est retiré. Ce matériau est caractérisé par une susceptibilité négative d'intensité très faible. (de l'ordre de 10^{-5}). Le diamagnétisme est un phénomène qui s'exerce au niveau des électrons, en effet, ces derniers subissent un ralentissement autour de leur orbitales et acquièrent une polarisation magnétique opposée à la direction du champ magnétique. Une déformation de l'orbitale atomiques est à l'origine de cette manifestation, à l'échelle macroscopique, le phénomène se traduit par l'application de la loi de Lenz.

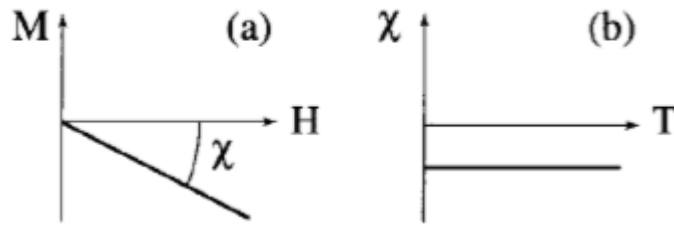


Figure I .4.: (a) les variation de l'aimantation sous l'effet du champ magnétique,(b) la variation thermique de la susceptibilité magnétique pour une substance diamagnétique.

I.3.4. Matériaux Paramagnétiques (PM) :

Le paramagnétisme se manifeste, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, un matériau paramagnétique est susceptible d'acquérir une aimantation orientée ayant le même sens que le champ magnétique appliqué. Les matériaux paramagnétiques sont caractérisés par une susceptibilité magnétique positive. Comme les matériaux diamagnétiques, ils sont classés non magnétiques, car ils ne présentent une aimantation qu'on présence d'un champ extérieur.

Sous l'effet de l'agitation thermique à température ambiante, les moments se présentent sous forme d'un arrangement chaotique, une forme de compensation mutuelle se dessine jusqu'à obtention d'une aimantation globale nulle, en appliquant un champ magnétique, les moments magnétiques ont tendance à s'aligner avec la direction du champ

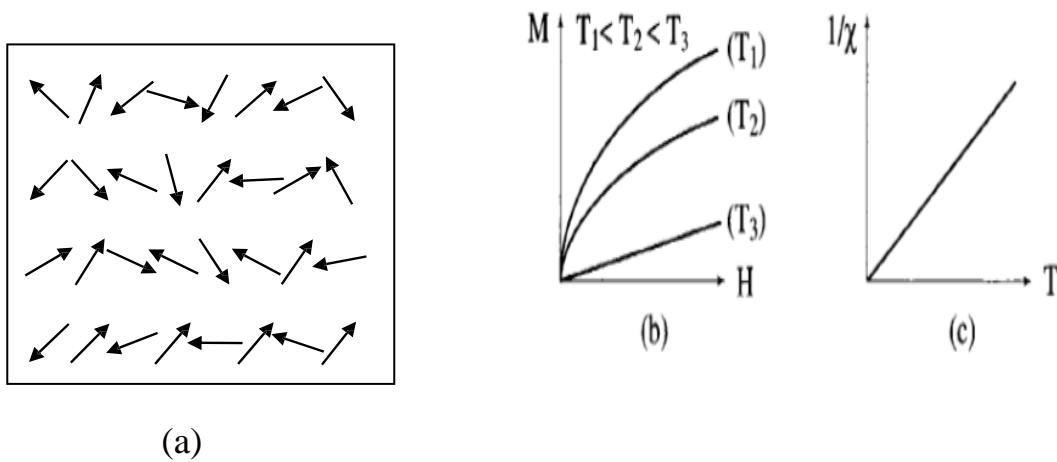


Figure I.5.: (a) paramagnétisme un réseau de spins ,(b) variation d'aimantation sous champ appliqué ,(c)variation thermique de $\frac{1}{\chi}$

I.3.5. Matériaux Ferromagnétiques (FM) :

Lorsque nous pensons aux matériaux magnétiques, les matériaux les plus courants qui nous apparaissent sont le fer, le nickel et la magnétite. Ceux-ci sont généralement appelés substances ferromagnétiques. Dans ce type de corps ferromagnétiques, les moments magnétiques sont orientés parallèlement. Il existe alors une aimantation spontanée même en l'absence d'un champ magnétique appliqué. L'agitation thermique demeure impuissante à briser cet alignement tant que le matériau n'a pas atteint une certaine température T_c dite température de Curie. Avec ce type de matériaux on peut observer une grande orientation des moments magnétiques déjà avec des champs magnétiques extérieurs faibles. Les matériaux ferromagnétiques ont une susceptibilité magnétique χ positive et grande.

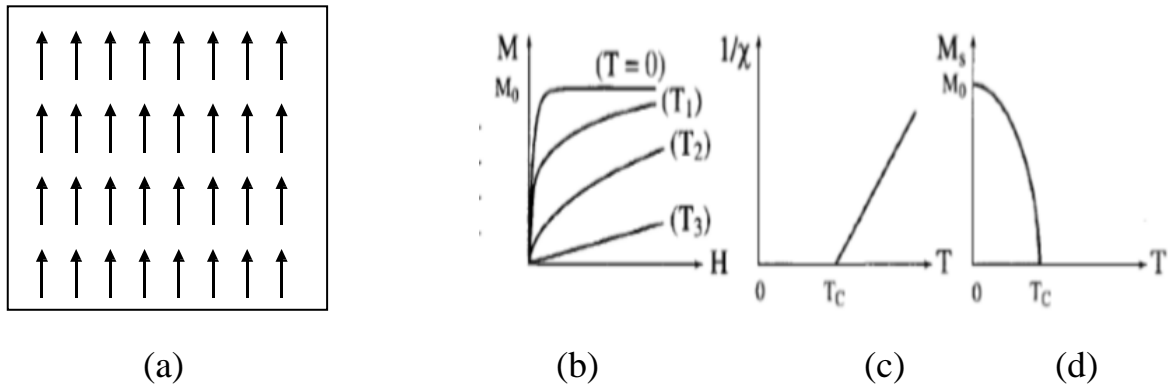


Figure.I.6. (a) : Un réseau de spins,(b) :variation sous l'effet du champ d'aimantation ($T_i < T_e < T < T_s$),(c) :variation thermique de $\frac{1}{\chi}$, (d) : variation thermique de aimantation spontanée .

I.3.6. Matériaux Ferrimagnétiques (FIM) :

Dans un matériau ferrimagnétique, les directions des moments magnétiques sont parallèles et les sens des moments magnétiques voisins sont opposés Figure. II. 2(a) mais le moment magnétique global n'est pas nul, car les différents moments magnétiques élémentaires ne présentent pas la même intensité. De quoi observer une aimantation spontanée du matériau, même en l'absence de champ magnétique extérieur appliqué. Une aimantation toutefois généralement plus faible que dans le cas d'un matériau ferromagnétique

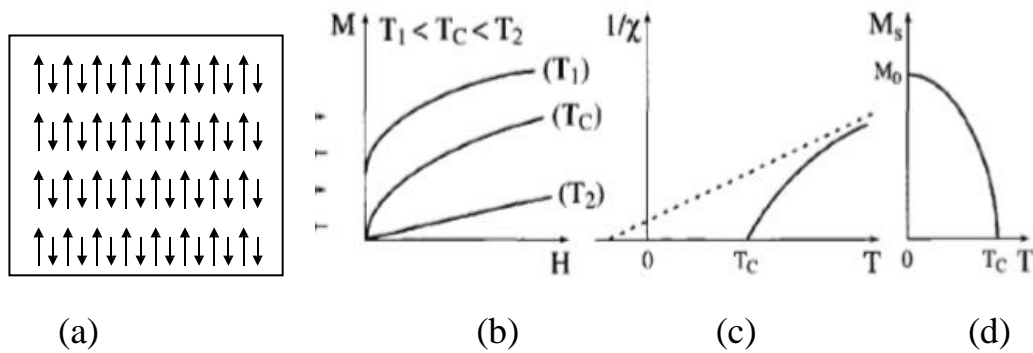


Figure I.7.:(a) un réseau de spins, (b) variation de l'aimantation sous champ appliqué , (c)variation thermique de $\frac{1}{\chi}$, (d) variation thermique de l'aimantation spontanée

I.3.7. Matériaux Antiferromagnétiques (AFM) :

Les matériaux ferromagnétiques [4] présentent des alignements antiparallèles des moments magnétiques atomiques, ils sont égaux en grandeur et en sens inverse. L'aimantation du matériau total est alors nulle et présente une susceptibilité magnétique positive mais faible à comparer devant celle des matériaux ferromagnétiques

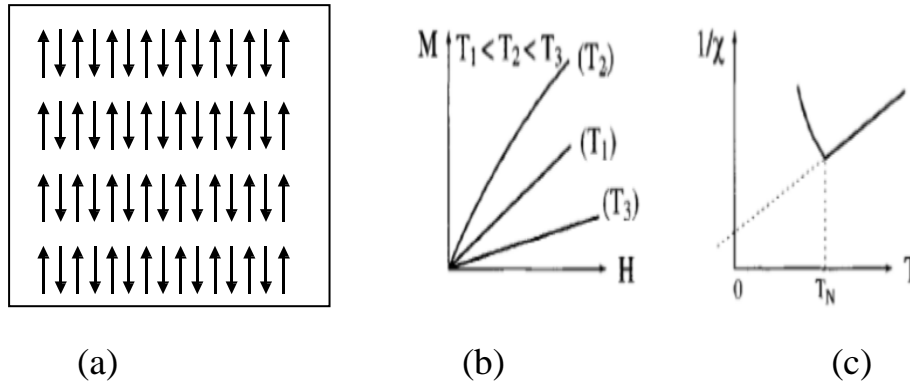


Figure 1.8. : (a) : un réseau de spins, (b) : variation de l'aimantation sous champ appliqué, (c) : variation thermique de $\frac{1}{\chi}$

I.4. Alliage Heusler :

Les alliages Heusler sont connus depuis plus de 100 ans [10,11], exactement en 1903 quand l'ingénieur Fritz Heusler découvre au cours de son travail sur un alliage contenant du cuivre, du magnésium et de l'aluminium avec une formule de type Cu_2MnAl , que ce matériau se comporte comme un matériau ferromagnétique malgré que ses éléments constitutifs ne sont pas des matériaux magnétiques [12,14]. Cette découverte a donné naissance à une nouvelle catégorie de matériau.

Composés Heusler X_2YZ

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. I.9. : Tableau périodique des éléments. Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert. Un grand nombre d'alliages Heusler est possible d'être formé par la combinaison des différents éléments indiqués au tableau [15]

Les alliages Heusler sont classés en deux grandes familles en fonction de leur composition chimique, ils sont les suivants :

I.4.1. Les alliages demi-Heusler (Half-Heusler) :

Défini par la formule chimique XYZ avec une stœchiométrie (1 :1 :1) ; dans le cas général, ces alliages peuvent être compris comme des composés constitués de deux parties, une partie covalente et l'autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, alors que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique [14, 15, 17].

Les éléments X et Y peuvent être des éléments d'un groupe principal, des métaux de transition ou des éléments des terres rares. L'élément Z est un élément d'un groupe principal qu'il est plus électro-négatif comme le Ge, Sn, Sb.

I.4.1.1. Structure cristalline des alliages demi-Heusler :

Les alliages demi-Heusler se cristallisent dans une structure cubique non-centrosymétrique (groupe spatial numéro 216, $F-43m$, $C1_b$) [14] où deux éléments forment une structure NaCl et le troisième occupe quatre sites tétraédrique du réseau (1/4,1/4,1/4).

Ce type de structure peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées, dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z [18].

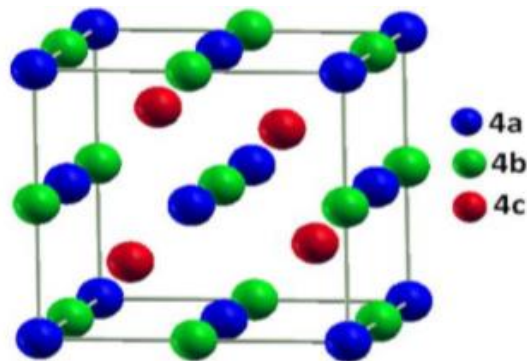


Figure I .10: structure de demi-Heusler (Half-Heusler)

On trouve, trois arrangements atomiques différents et possibles dans ce type de structure comme indiquant dans le tableau ci-dessous :

Phases	4a(0, 0,0)	4b(1/2, 1/2, 1/2)	4c(1/4,1/4, 1/4)
type I	X	Y	Z
type II	Z	X	Y
type III	Y	Z	X

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

I.4.2. Les alliages Heusler (Full-Heusler) :

Ce type est connu par sa formule générale X_2YZ avec une stœchiométrie (2 :1 :1), où X et Y sont souvent des métaux de transition et Z est un élément non magnétique du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Dans des cas

rarissimes, l'élément Y peut être remplacé soit par un élément des terres rares, soit par un métal alcalino-terreux.

I.4.2.1. Structure cristalline des alliages Heusler (Full-Heusler)

Ces composés se cristallisent dans la structure cubique dans le groupe d'espace cubique $Fm\bar{3}m$ (groupe d'espace N° 225) [14], avec un prototype Cu_2MnAl noté souvent (L21). Dans ce prototype les atomes X occupent les sites tétraédriques $(1/4, 1/4, 1/4)$, les atomes Y se trouvent au niveau des sites octaédriques $(1/2, 1/2, 1/2)$ et les atomes Z sont placés au sommet $(0, 0, 0)$ et aux centres des faces.

Dans le cas où le numéro atomique de l'élément Y est supérieur à celui de l'élément X ($Z(Y) > Z(X)$), une structure inverse est observée [26]. Souvent, cette structure inverse est désignée dans la littérature par X, avec le prototype $CuHg_2Ti$. Cette structure cristallise dans le groupe d'espace cubique $F\bar{4}3m$ (groupe d'espace N° 216) [14].

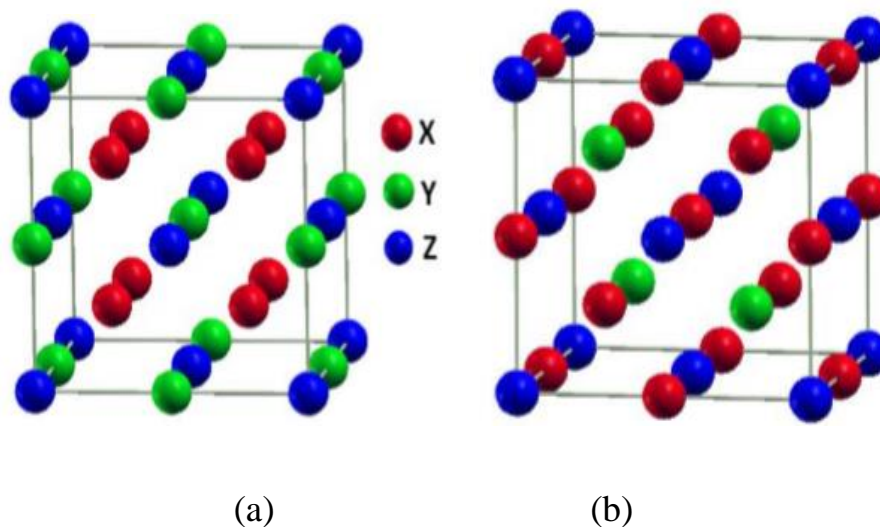


Figure I.11 : Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler) : a) régulière ; b) inverse

Généralement les atomes dans les alliages d'Heusler peuvent s'arranger sous plusieurs phases cristallographiques en fonction de l'ordre des atomes au sein de la maille cristalline où on distingue [14, 15] :

- La phase L21 de type Cu_2MnAl a été expliquée précédemment, où tous les atomes sont parfaitement ordonnés.

- La phase B2 de type CsCl, où les sites correspondants aux atomes Y et Z sont occupés d'une manière aléatoire par ces deux atomes.
- La phase C1 de type CaF₂, les sites correspondants aux atomes X et Z sont occupés d'une manière aléatoire par ces deux atomes.
- La phase B32a de type NaTl où les atomes X qui occupent le réseau cfc, sont mélangés avec les atomes Y, alors que les atomes X sur les sites tétraédriques sont mélangés avec les atomes Z.
- La phase DO₃ de type BF₃, les atomes X et Y ou les atomes X et Z sont distribués de façon aléatoire.
- La phase A₂ de type W (tungstène) où tous les sites atomiques sont occupés par hasard par les trois types d'atomes.

. Les six phases sont représentées sur la figure suivante :

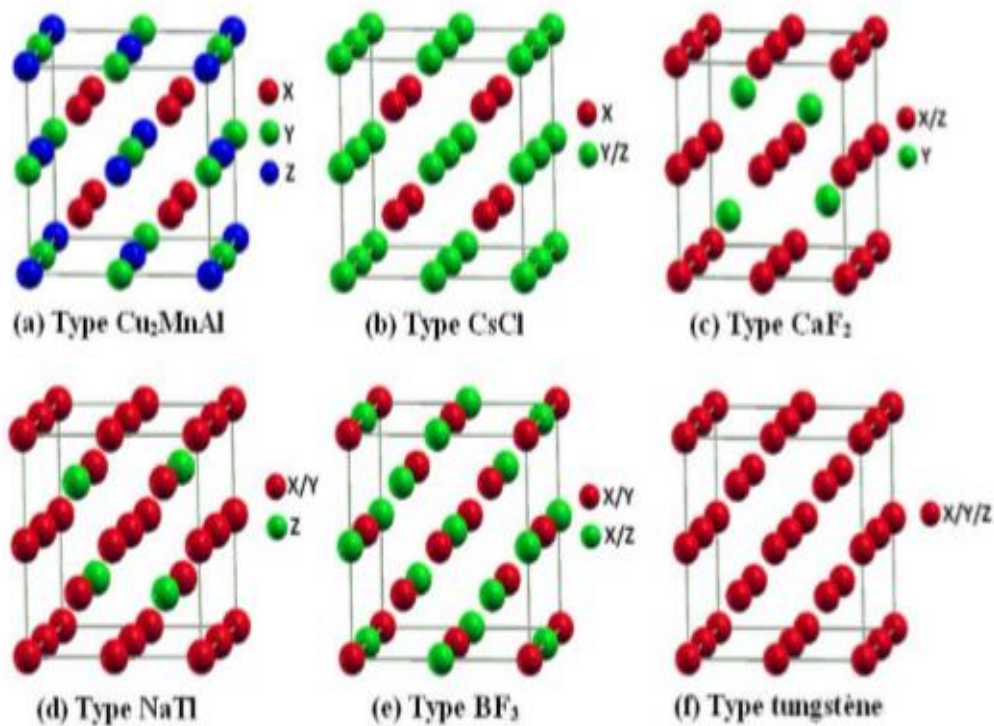


Figure I.12: Les différents types de désordre pouvant survenir dans la structure (half/full) Heusler: (a) désordre de type Cu₂MnAl , (b) désordre de type CsCl, (c) désordre de type CaF₂, (d) désordre de type BF₃, (e) désordre de type NaTl et (f) désordre de type tungstène.

Notant que le type désordre CaF_2 est observé seulement pour les demi-Heusler, tandis que le type désordre BiF_3 est observé pour les full-Heusler.

I.4.3. Autre famille pour les alliages d'Heusler :

Il existe une autre famille pour les alliages d'Heusler, c'est le cas de composés Heusler quaternaires où il y a quatre atomes de nature chimique différentes, leur formule générale est $\text{XX}'\text{YZ}$, où X et X' sont situés dans les positions 4a et 4d, respectivement, l'élément Y est placé sur les positions 4b tandis que l'élément Z est placé sur les positions 4c. Cette structure présente le prototype LiMgPdSn

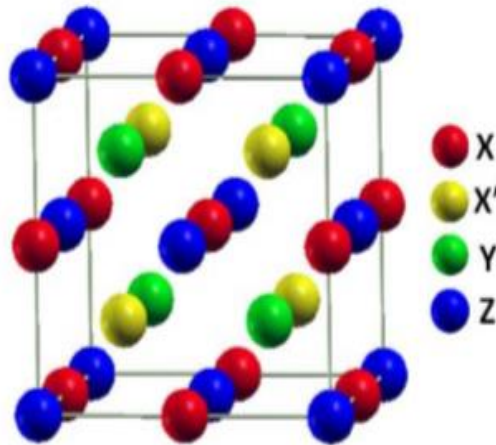


Figure I.13 : structure d'Heusler quaternaire

I.5. Classification du matériau Half-Heusler FeVSn

Le matériau étudié appartient au système cristallin cubique à face centrée, présente 4 axes de rotation d'ordre 3 dont les vecteurs de base $|\vec{a}| = |\vec{b}| = |\vec{c}|$, avec des angles d'axes $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$

Notre composé appartient à la famille XYZ, X et Y sont des métaux de transition et Z un élément de la colonne III, IV ou V du tableau périodique des éléments, beaucoup de travaux de recherches convergent sur ces composés, du fait qu'un grand nombre de combinaisons d'éléments pouvant participer à leur formation, donnant naissance à des matériaux prometteurs dont les propriétés

physiques intrinsèques portent un intérêt direct sur le développement et qui peuvent aboutir à des applications diverses . En raison du développement de la spintronique, ces composés forment une nouvelle classe de semi-conducteur , d'autre part les ferromagnétiques demi-métalliques forment une toute nouvelle classe de matériaux. Ces matériaux sont capables de générer un courant polarisé entièrement en spin et d'optimiser ainsi l'efficacité du dispositif spintronique

Le composé demi-Heusler FeVSn cristallise dans le groupe d'espace à structure cubique à face centrée (groupe spéciale F43m, numéro 216), cette structure étant formée par trois mailles cubiques à faces centrées (CFC) interpénétrés

Atome	Z	R _{MT}	Positions :
Fe	26	2,2	4a (0, 0, 0)
V	23	2,1	4b (1/2, 1/2, 1/2)
Sn	50	2,3	4c (1/4, 1/4, 1/4)

Tableau. I.2:les positions, le nombre atomique et R_{MT} des éléments composant FeVSn.

I .6.Conclusion :

Nous avons discuté dans ce chapitre de ce qu'est un La spintronique et des différentes classes de magnétisme en plus, des différentes formes existantes des alliages d'Heusler. Nous nous sommes intéressé à l'étude du composé appartenant à la famille générale XYZ, X et Y sont des métaux de transition et Z un élément de la colonne III, IV ou V du tableau périodique des éléments.

Références :

[1] : NOURI Toufik, Étude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques du composé Heusler quaternaire Ti Zr Rh Al : FP-LAPW, mémoire de master

[4]: B. Loegel et F. Gautier, J. Phys. Chem. Sol. 32 (1971) 2723.

[5] : M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F.r , , université de saida, 2018 – 2019

[2]: N.F. Mott, Proc. Roy. Soc.A 153(1936) 699.

[3]: A. Fert et I. A. Campbell, Phys. Rev. Lett. 21 (1968) 1190, J. Physique 32 (1971) C1-46, J. Phys. F 6 (1976) 849.

Petroff, P . Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, Phys. Rev. Lett.61(1988) 2472.

[6] : G. Binash, P . Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, Phys. Rev. B 39 (1989) 4828.

[7] Bavay, J.-C. and J. Verdun, Les aciers électriques pour transformateurs et machines tournantes. Situation actuelle et perspectives. Le Journal de Physique IV, 1992. 2(C3): p. C337-C3-46.

[8] : Pauling, L.C., The theoretical prediction of the physical properties of many electron atoms and ions. Mole refraction, diamagnetic susceptibility, and extension in space. Proc. R. Soc. Lond. A, 1927. 114(767): p. 181-211.

[9] :Rappe, A.M., et al., Optimized pseudo potentiels. Physical Review B, 1990. 41(2): p. 1227.

[10] :A. Kellou, N. E. Fenineche, T. Grosdidier, H. Aourag, C. Coddet, Journal of applied physics, Vol 94, No 5, (2003).

[11] :Xinlin Yan, A. Grytsiv, P. Rogl, V. Pomjakushin, M. Palm, Journal of Phase Equilibria and Diffusion, Vol. 29, No 6, (2008).

[12] :F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG 5 (1903) 220.

[13] :F. Heusler, Verh DPG 5 (1903) 219.

[14] : H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse (2015).

[15] :H. ZENASNI, « Etude théorique des propriétés magnétique électronique et structurales des alliages Heusler », Université de Tlemcen, Thèse (2013).

[16] : H. Tuzcuoglu , « Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co_2FeAl », Laboratoire des sciences des procédés et des matériaux (LSPM) Université Paris Nord-Paris XIII ,Thèse (2014).

[17] :S. Sakurada, N. Shutoh, Appl Phys Lett 86 (2005) 082105.

[18] : P. J. Webster, K. R. A. Ziebeck, Landolt-Börnstein - group III condensed matter, vol. 19C. Berlin: Springer; 19 (1988) 75-184.

[19] : M. Puselj, Z. Ban, Croat Chem Acta 41 (1969) 79.

CHAPITRE II :

Méthodes de calcul

II.1.Introduction :

Au début du XXI siècle la quantique s'est imposée, utilisée comme fer de lance par les physiciens afin d'expliquer et résoudre certains problèmes que la mécanique classique était incapable de les traiter, l'équation de Schrödinger considérée comme pilier de ce nouveau formalisme, s'attaquait à la résolution du problème à N corps. Très vite, il n'a pas fallu beaucoup de temps aux physiciens de cette époque de ce rendre compte que le problème est beaucoup plus complexe, la résolution de l'équation de Schrödinger est difficile à résoudre pour les particules polyatomiques, il était donc judicieux pour les physiciens de faire un certain nombre d'approximations scientifiques afin de simplifier les calculs, permettant de déduire les propriétés distinctives des matériaux étudiés, ces approximations ont fait l'objet d'énorme progrès dans le domaine de la recherche, particulièrement en sciences des matériaux, s'appuyant sur des algorithmes mathématiques, dotés des machines informatiques puissantes, capables de réduire le temps de calcul considérablement et des programmes spécifiques adaptés à ce type de recherche et d'études. On peut retenir trois approches fondamentales : les méthodes empiriques ,les méthodes semi- empiriques ,les méthodes ab-initio. Nous retiendrons cette dernière pour étudier les propriétés du composé Fe V Sn .

Dans la méthode ab -initio en utilisant seulement les constantes atomiques comme paramètres d'entrée pour la résolution de l'équation de Schrödinger[1].

II.2 Equation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger est à la base de la mécanique quantique, sa résolution nous donne des informations concernant les électrons d'un atome telles que la fonction d'onde, la position et la probabilité de présence. Mais le traitement du problème à N corps (équation à plusieurs corps) rend sa résolution quasi impossible, du fait de l'interaction des électrons avec les noyaux qui composent les matériaux et interagissent entre eux. Des approximations ont vu le jour dans le but de simplifier le problème, on cite parmi eux, l'approximation de Hartree Fock, Born-Oppenheimer

$$H\Psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{II.1})$$

Avec Ψ : la fonction d'onde et H : est hamiltonien du système définie par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + v(\vec{r}, t) \quad (\text{II.2})$$

Le premier terme désigne l'énergie cinétique, le deuxième c'est le potentiel.

Dans le cas des processus stationnaires et pour un système à N électrons et M noyaux

L'équation de Schrödinger indépendante du la tempe s'écrit :

$$H\Psi(\vec{r}_n, R_M) = E\Psi(\vec{r}_n, \vec{R}_M) \quad (\text{II.3})$$

\vec{r}_n : définissent les positions des n électrons

\vec{R}_M : définissent les positions des M noyaux.

E : énergie totale, elle s'obtient en appliquant l'Hamiltonien H sur la fonction d'onde Ψ

H est l'hamiltonien de système qui contient N électrons et M noyaux et s'écrit sous la forme[2] :

$$H_{\text{total}} = \sum T + V(r, t) = T_n + T_e + V_{nn} + V_{ne} + V_{ee} \quad (\text{II.4})$$

T_n : Énergie cinétique des M noyaux de masse M_n

T_e : Énergie cinétique des N électrons de masse m_e

V_{nn} : est l'interaction coulombienne répulsive noyau-noyau

V_{ne} : est l'interaction coulombienne attractive noyau-électron

V_{ee} : est l'interaction coulombienne attractive électron-électron

Actuellement, les connaissances mathématiques ne sont pas en mesure de résoudre l'équation (II.1), la question reste poser[3], comment résoudre le problème à N corps ?

Pour contourner le problème, il est nécessaire d'utiliser les nombreuses approches développées telles que l'approximation de Born-Oppenheimer et l'approximation de Hartee-Fock

II.3.Approximation de Born Oppenheimer :

également connue sous le nom d'approximation adiabatique (Max Born (1882-1970) Robert Oppenheimer (1904-1967))[3]. Pour simplifier le problème, cette approximation consiste à traiter les électrons et les noyaux de façon séparés dans la fonction d'onde.

En tenant compte de la grande différence d'inertie des noyaux et des électrons, ces derniers se déplacent beaucoup plus vite que les noyaux et influent directement sur leurs positions. En se basant sur l'importante différence de masse (noyau électron), à titre indicatif,, il faut savoir que la masse du proton au repos est 1836 fois celle de l'électron, il s'en suit que le mouvement des noyaux est beaucoup plus long que celui des électrons, par conséquent l'énergie cinétique des noyaux peut être négligée et l'énergie de répulsion noyaux-noyaux devient constante [4]

C'est-à-dire que $T_{n-n} = 0$ et $V_{n-n} = \text{constante}$

La fonction d'onde peut s'écrire dans cas sous forme d'un produit de deux fonctions d'ondes

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_n(\vec{R}) \cdot \Psi_e(\vec{r}, \vec{R}) \quad (\text{II.5})$$

$$H_{\text{total}} = T_e + V_{ne} + V_{ee} \quad (\text{II.6})$$

L'énergie totale est la somme des contributions électroniques, mais l'étude de l'interaction électrons – électrons est très complexe d'où l'incapacité de cette approche à cerner le problème, cependant, il est nécessaire de coupler cette approche avec une autre approximation, dite approximation de Hartree-Fock[5], pour résoudre l'équation de Schrödinger telle qu'elle est présentée dans l'équation (1.5). Un calcul ab initio s'avère nécessaire.

II.4. Les méthodes ab initio :

Les méthodes ab-initio sont basées sur la résolution complète des équations de Hartree-Fock, c'est-à-dire le calcul de tous les termes énergétiques et donc de toutes les intégrales. La méthode HF considère l'interaction électronique comme un champ moyen. C'est à dire que chaque électron ressent l'effet des autres électrons de façon

II.5. Approche de Hartree-Fock :

Connue aussi sous le nom de l'approximation du champ self consistant [6]. Hartree(1928) Fock (1930). Proposée par Hartree en 1928[7], cette approche consiste à remplacer le système à N électrons par N systèmes à un seul électron qui se déplacent indépendamment les uns des autres, leur mouvement est décorrélé et on peut substituer l'interaction de chaque électron avec le reste de l'atome par l'interaction avec un champ moyen créé par le noyau et le reste des autres électrons

En conséquence la fonction d'onde du système peut s'écrire sous forme d'un produit de fonction d'onde de chaque électron (la produit de Hartree) et l'énergie totale s'obtient par la somme des énergies de chaque électron.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \Psi_1(r_1) \cdot \Psi_2(r_2) \cdot \Psi_3(r_3) \cdot \dots \cdot \Psi_N(r_N) \quad (\text{II.7})$$

Pour que le système décrit ait un sens physique, les électrons doivent obéir au principe d'exclusion de Pauli en introduisant le spin et qui entraînaient obligatoirement l'apparition d'un signe négatif lors de la permutation de deux électrons dans la fonction d'onde.

$$\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1)$$

Les fonctions d'ondes mono-électroniques peuvent être considérées comme étant une combinaison linéaire de toutes les fonctions de Hartree et s'écrivent sous forme de déterminant de Slater [8]

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} \Psi_1(x_1) & \cdots & \Psi_n(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_1(x_n) & \cdots & \Psi_n(x_n) \end{pmatrix} \quad (\text{II.8})$$

II .6. Théorie de la fonction de la densité :

(Density Functional Theory) méthode de calcul quantique utilisée pour étudier les propriétés structurales, la DFT est l'une des méthodes la plus utilisées au début du XXI^e siècle [9]. Introduite par Thomas Fermi en 1927.

A la différence de la méthode de Hartree-Fock, qui suppose que l'énergie totale du système est une fonctionnelle de la fonction d'onde. L'énergie totale du système à l'état fondamental est définie dans le formalisme de la DFT comme une fonctionnelle de la densité électronique de l'état fondamental. La conception de l'équation de Schrödinger décrite par cette théorie sera basée sur la densité électronique et exposée par le théorème de Hohenberg et Kohn en 1964 [10]

II .7. L'approche kohn – scham :

Proposée par kohn et scham en 1965[11], son objectif consiste à déterminer les propriétés exactes d'un système à N particules en utilisant des méthodes à particules indépendantes .L'énergie fonctionnelle est donnée par

$$E_{ks}[\rho(r)] = T_e[\rho(r)] + E_H[\rho(r)] + E_{xc}[\rho(r)] + \int V_{ext}(r)\rho(r) dr \quad (\text{II.10})$$

Avec

$E_{ks}[\rho(r)]$: Fonctionnelle kohn et scham

$T_e[\rho(r)]$: Energie cinétique de N électrons en interactions dans un potentiel effectif

$E_H[\rho(r)]$: Energie de Hartree

$E_{xc}[\rho(r)]$: Fonctionnelle d'échange – corrélation

$V_{ext}(r)$: Un potentiel externe

$\rho(r)$: la densité d'un système en interaction

D'outre part :

$$E_{ks}[\rho(r)] = F_{ks}[\rho(r)] + \int V_{ext}(r)\rho(r) dr \quad (\text{II.11})$$

Cette approche permet de substituer le système à N électrons en interactions dans un potentiel externe. L'hypothèse principale de l'approche kohn et scham est : qu'à chaque système de N électrons en interaction avec un potentiel externe excite un potentiel effectif V_{eff} (potentiel kohn– scham) autrement dit, la densité d'un système sans interaction est égale la densité en interaction

D'après la reformulation de kohn et scham, on peut définir l'hamiltonien, l'équation de kohn et scham et sa fonction d'onde fondamentale Ψ_{ks}

Ψ_{ks} fonction d'onde représentée par un déterminant Slater $\varphi_i(r)$ (orbite kohn scham).[12]

$$\left[-\frac{\nabla^2 \hbar}{2m} + V_{eff}(r) \right] \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (\text{II.12})$$

ε_i : Energie correspondant à l'orbite kohn scham

$$V_{eff} = V_{ext}(r) + V_H[\varphi(r)] + V_{xc}[\varphi(r)] \quad (\text{II.13})$$

$V_H[\varphi(r)]$: Potentiel coulombien classique

$$V_{xc}[\varphi(r)] : \text{Potentiel d'échange – corrélation et } V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}[\varphi(r)]}{\partial \varphi(r)} \quad (\text{II.14})$$

Donc la densité de système :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2 \quad (\text{II.15})$$

On peut déduire que l'équation kohn – scham repose sur le calcul du potentiel kohn–scham et on remarque que ce potentiel dépend de la fonctionnelle de l'énergie d'échange–corrélation, son calcul très complexe nécessite l'intervention de méthodes d'approximation. On peut citer deux approximations, le premier est la LDA : densité locale, la deuxième est la GGA : gradient généralisé.

II.8.L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

Est une amélioration significative elle tient compte de l'inhomogénéité de la densité électronique [1 3][14] . Dans le cas des approximations de type GGA la fonctionnelle énergie d'échange – corrélation s'écrit comme suit :

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(r) f_{xc}^{GGA} [\rho(r) \nabla \rho(r)] dr \quad (II.15)$$

$f_{xc}^{GGA} [\rho(r) \nabla \rho(r)]$: Fonction de la densité locale

E_{xc}^{GGA} définie en 1992 par Perdew et Wang [1 3][14] . et deux scientifiques, introduisant le spin. Elle prend en considération les deux états : up $\rho(\uparrow)$ et down $\rho(\downarrow)$, la fonction de la densité locale E_{xc}^{GGA} sera fonction des deux spins :

$$E_{xc}^{GGA} [\rho \uparrow (r), \rho \downarrow (r)] = \int \rho(r) f_{xc} [\rho \uparrow (r), \rho \downarrow (r) \nabla \rho \uparrow (r) \nabla \rho \downarrow (r)] dr \quad (II.16) ;$$

L'approximation GGA donne de meilleurs résultats quand on traite des systèmes magnétiques

II .9.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées

(LAPW):

Dans les méthode LAPW Les fonctions de base à l'intérieur de la sphère sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_L(r) Y_{Lm}(r)$ et leurs dérivés $\dot{U}_L(r) Y_{Lm}(r)$ par rapport à l'énergie.

Les fonctions U_L sont définies comme dans la méthode (APW) et la fonction doit $\dot{U}_L(r) Y_{Lm}(r)$ satisfaire la condition suivante

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{L(L+1)}{r^2} + V(r) - E_L \right) r \dot{U}_L(r) = r U_L(r) \quad (II.21)$$

La fonction d'onde s'écrit :

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{cases} \sum A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) + B_{Lm}(r) \dot{U}_{Lm}(r) & \{ r < r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(\vec{K}+\vec{G})\vec{r}} & \{ r > r_0 \end{cases} \quad (II.22)$$

A_{lm} : Sont des coefficients correspondant à la fonction $U_l(r)$

B_{Lm} : Sont des coefficients correspondant à la fonction $\dot{U}_{Lm}(r)$

Les fonctions (LAPW) sont des ondes planes uniquement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW [15].

II.10. Le Code Wien2k :

Le code WIEN2k : est un ensemble de programmes informatique écrit en langage fortran qui a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz [15] de l'Institut de Chimie des Matériaux de l'Université Technique de Vienne (Autriche). Ce code a été distribué pour la première fois en 1990. Le code wien2k est basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Il comporte plusieurs programmes séparés et liés par un script C-SHEL permettant d'effectuer des calculs auto-cohérents[1].

II.11. Conclusion :

Nous avons présenté dans ce chapitre la méthodologie qui nous servira tout au long de ce travail. Il s'agit d'une méthode pour déterminer les propriétés physique du FeVSn, axée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Sa mise en œuvre est faite à l'aide du code de calcul wien2k. Cette méthode nécessite un certain nombre d'approximations pour la rendre pratique dans la majeure partie des simulations.

Référence :

- [1] :MATOUGUI MOHAMED ,étude ab-initio des propriétés physique des matériaux Heusler (X_2YZ) et demi Heusler (XYZ),thèse doctorat , université Abdelhamid ibn Badis de Mostaganem ,2019/2020.
- [2] :YAGOUBI AHMED ,étude de propriété physique de alliage half- Heusler Co Mn Te , mémoire master en physique , université Dr .Tahar Moulay de Saida ,2016-2017,p 6et7 .
- [3] : W. Kohn, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 12531266
- [4] : [http:// www.techno-science .net/](http://www.techno-science.net/)
- [5] : [http://www.physics.ohio-state .edu /~aulbur/dft.html](http://www.physics.ohio-state.edu/~aulbur/dft.html) .
- [6] :JEAN AIME NGOLLO MATEKE ,détermination par méthodes ab-initio des courbes de potentiels du monoxyde d'azote, mémoire de doctorat ,université de douala, en 2005.
- [7] : HOUARI BRAHIM ,spectroscopie électronique et couplage spin-orbite de composes organométalliques ,thèse de doctorat , cotutelle entre université d'Oran et université Strasbourg, 17/06/2013.
- [8] :YAGOUBI ABDELKADER, Etude des propriétés Structurale, électronique, magnétique et comportement Half-métallique du Ru Mn Te, mémoire master en physique , université Dr .Tahar Moulay de Saida ,2016-2017 .
- [9] : <http://en.wikipedia.org/wiki/DFT>.
- [10] :RACHDI AMEL, étude de premier principe des propriétés magnétique et optoélectronique et thermodynamique des doubles pérovskites Ba_2XWO_6 ($X=Ni$,Co, Mn), thèse de doctorat, université ibn khaldoun – Tiaret, 2020.
- [11] :W.KOHN et L.JSCHAM, physique Rev 140, A 1133,(1964) .
- [12] :W. KOHN, Rev. Mod. physique.71 ,51 ,1253(1990)

[13] : J . P. Perdew , J. A . Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. A. Pederson , D. J. Singh

[14] : J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof , Phys. Rev .Let.77 (1996) 3865

[15] : Singh, D., Planes Waves, Pseudopotentials and the LAPW, 1994, Méthode, Kluwer Academic .

CHAPITRE III

Résultats

et

Discussions

III.1 Introduction :

Dans le but d'étudier un matériau, mettre en valeur ses propriétés et calculer ses paramètres d'équilibre, diverses méthodes ont été élaborées et utilisées notamment, l'expérimentation basée sur l'expérience et l'observation mettant en exclusion la théorie, jusqu'à présent, il était difficile et non disponible dans beaucoup de pays à cause du coût exorbitant pour réaliser des expériences. De ce fait, de nouvelles méthodes de calcul ont vu le jour, des méthodes basées sur la théorie et utilisant la technique de simulation, on peut citer la méthode semi-empiriques utilisent les données qui ont une origine dérivant des résultats expérimentaux et ce, dans le but de simplifier le calcul.

Les méthodes du premier principe ou dite méthodes ab-initio n'incluent aucun paramètre empirique ou semi-empirique dans leurs équations, ils dérivent les résultats directement à partir des principes théoriques sans pour autant faire appelle à des données expérimentales.

Après un calcul ab-initio, ce chapitre est consacré aux résultats et discussion concernant les propriétés structurales, électronique et magnétique du demi-Heusler FeVSn en utilisant la théorie de la fonctionnel de densité (DFT) par la méthode FP-LAPW, intégrée dans le code Wien2k

III.2.Présentation du FeVSn :

Le composé demi-Heusler FeVSn cristallise dans le groupe d'espace à structure cubique à face centrée (groupe spéciale F43m, numéro 216), cette structure étant formée par trois mailles cubiques à faces centrées (CFC) interpénétrés.

Atomes	Z	R _{MT}	Positions
Fe	26	2.2	4a (0, 0, 0)
V	23	2.1	4b (1/2, 1/2, 1/2)
Sn	50	2.3	4c (1/4, 1/4, 1/4)

III.3.Méthodes de calcul utilisé :

III .3.1.1Introduction :

Ce travail a été réalisé grâce au code de modélisation numérique appelé Wien2k, développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz de l'institut de chimie des matériaux de l'université technique de Vienne en Autriche. Distribué pour la première fois en 1990 [1]. C'est un code de calcul ab-initio, il fait parti d'un package de logiciels de simulation numérique. Depuis, il n'a cessé d'être révisé et a subi plusieurs mise à jour. Développé et amélioré en continu (Wien93, Wien97, Wien2k (2000)). Dans notre travail, nous avons retenu la version Wien2k. il existe la version Wien2k (2011), plus rapide en terme de calcul, permet d'utiliser de nouveaux appareils, plus conviviales point de vu interface utilisateur [2]. Le package Wien2k est écrit en langage FORTRAN90 et fonctionne sous le système d'exploitation UNIX offrant une performance de calcul quantique sur les solides périodiques. Il se compose de plusieurs programmes indépendants basée sur la DFT, le terme échange corrélation apparaît dans ce code sous la version LDA de Perdew et Wang[3], GGA de Perdew, Burke et Ernzerhof[4], le code Wien2k, utilise aussi la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) pour résoudre les équations de Kohn-Sham . la méthodes des ondes planes linéarisées FP-LAPW) [4] est une procédure destinée à résoudre les équation de Kohn et Sham pour trouver la densité de l'état fondamental, l'énergie totale et les valeurs propres d'un système à plusieurs électrons. Introduisant des bases qui sont spécialement adaptées au problème. La méthode FP-LAPW s'est avérée efficace pour calculer les propriétés physiques des matériaux qui ne dépassent pas un certain nombre d'électrons. Différentes méthodes de calcul ont été développées basées sur le formalisme de la DFT. Tous, utilisent l'hypothèse qu'il est possible de séparer les états électroniques en deux catégories, les états de cœur proche du noyau fortement liés et les états de valence, quelque soit l'approche utilisée, ils sont très éloignés. L'équation de Schrödinger s'applique uniquement aux états de valence. Les états de cœur sont traités soit par un calcul atomique, soit leur contribution est introduite dans un potentiel effectif qui n'agit que sur les électrons de valence. Le noyau les électrons de cœur étant ainsi éliminé

Par conséquent, les méthodes de la DFT sont classées en deux grandes catégories : Les méthodes « toutes électrons » et les approches dites pseudo-

potentiels. De même pour les potentiels, il existe deux classes principales : les potentiels tout électrons et les pseudo-potentiels. Nous avons utilisé dans notre mémoire la première catégorie. Le potentiel peut être total (Plein potentiel) dans le sens où qu'aucune approximation n'est utilisée pour sa description. Parmi les méthodes "tout électron", on compte la méthode des ondes planes augmentées linéairement (FP-LAPW). C'est la méthode la plus utilisée pour sa précision mais elle est longue pour le temps de calcul. Cette méthode est une modification fondamentale de la méthode des ondes planes augmentées (APW). L'idée de cette méthode (APW) est que la cellule primitive est divisée en deux types de région (Figure III.1)

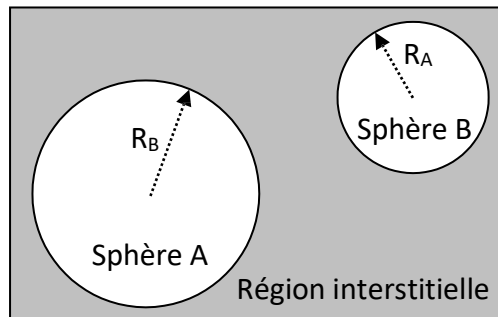


Figure.III .1: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères A et B de rayons muffin-tin R_A et R_B respectivement.

La première région appelée également la région Muffin-Tin dite sphère Muffin-Tin (composée des sphères qui ne se chevauchent pas), notée (MT), elle est prise près du noyau atomique, où le potentiel et la fonction d'onde sont similaires à ceux d'un atome isolé, c'est à dire ils varient fortement, donc, dans cette région qui est définie par des sphères atomiques (S) centrées sur les sites atomiques de rayons R_A (ou R_{MT}), le potentiel est à symétrie sphérique et les fonctions d'ondes sont des fonctions radiales « solution de l'équation de Schrödinger ».

La deuxième région est l'espace restant qui représente la région interstitielle, où le potentiel est considéré constant et les fonctions d'ondes utilisées sont des ondes planes. Dans cette méthode le calcul est basé sur l'énergie de coupure (cut-off) qui sépare les états du cœur de ceux de valence, il existe aussi deux paramètres essentiels qui doivent être

raffinés afin de décrire parfaitement les systèmes étudiés : le premier paramètre est le produit sans dimension $R_{mt}K_{max}$ noté RK_{max} , ce paramètre contrôle la taille de la base utilisée tels que R_{mt} représente le plus petit rayon de la sphère muffin-tin et K_{max} est la valeur maximale du vecteur d'onde de la base utilisée dans la description de l'ensemble du système des électrons présents dans l'espace entre les sphères atomique. Ce produit représente le plus grand vecteur des \vec{k}_n dans l'extension des ondes planes décrivant la région interstitielle. Le deuxième paramètre est le nombre de points spéciaux k utilisés pour l'intégration dans la zone de Brillouin.

Plusieurs propriétés des matériaux peuvent être calculées avec ce code, parmi lesquelles on peut citer [7] :

- Les bandes d'énergie, la densité des états.
- La densité d'électrons, la densité de spins.
- L'énergie totale, les forces atomique, les géométries d'équilibre, les optimisations de structure.
- La polarisation des spins (structure ferromagnétique, antiferromagnétique ou autres), le couplage spin-orbite

III.3.2. Résolution des équations de Kohn-Sham (l'auto-cohérence dans les calculs) :

les équations de Kohn-Sham admettent comme solution les coefficients pour les orbitales occupées et qui minimisent l'énergie totale. Afin de simplifier les calculs, on résout les équations de Kohn-Sham pour les points de symétrie dans la première zone de Brillouin. Cette résolution se fait par un processus itératif, utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent schématisé par l'organigramme de la figure .III.2.

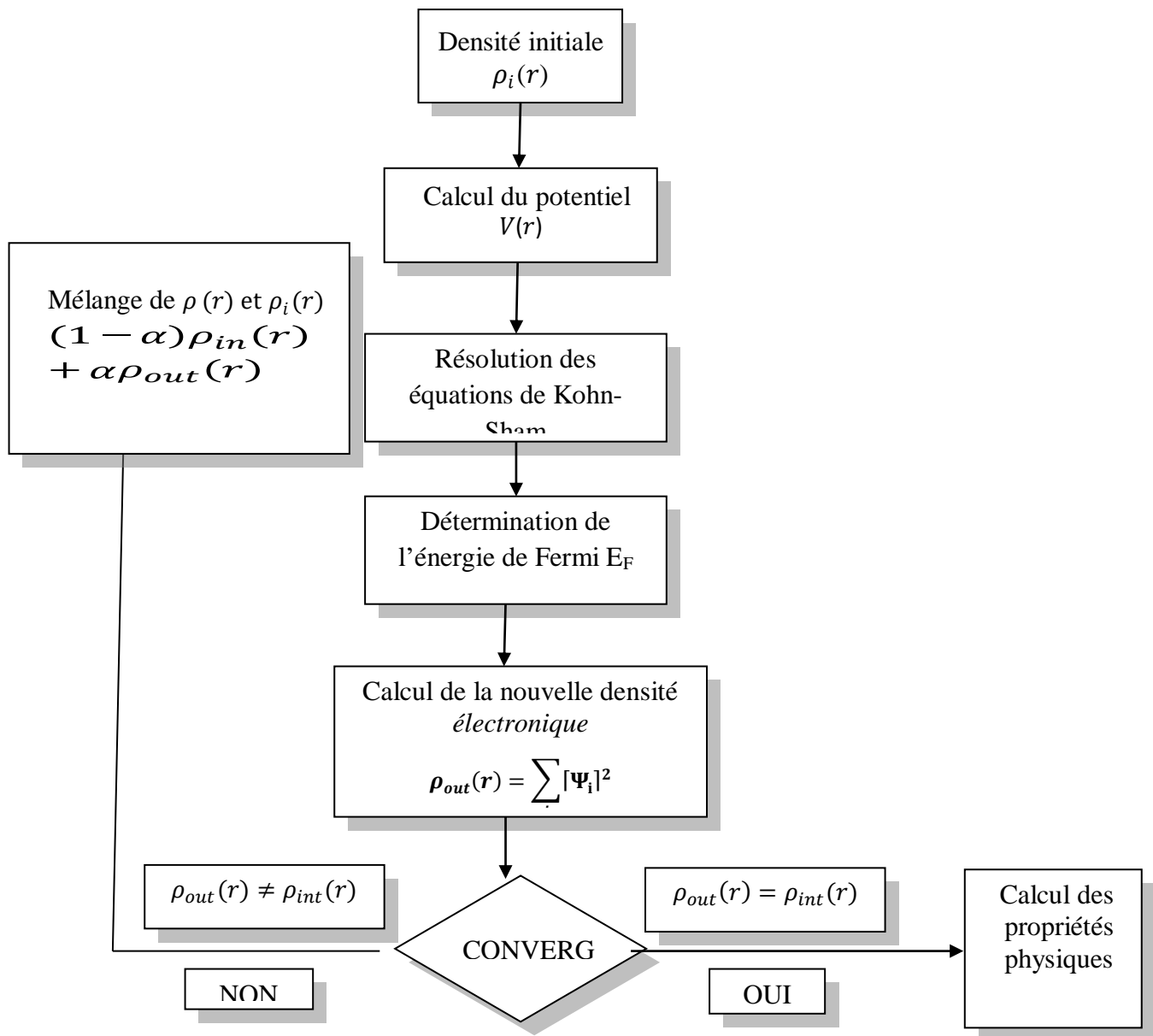


Figure.III.2 : représente l'organigramme d'un calcul auto-cohérent utilisant la méthode de la théorie de fonctionnelle de la densité électronique (DFT)

III.3.3.Détails de calcul :

Le calcul a été réalisé en adoptant la méthode d'approximation LAPW[8] sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) à l'aide du code Wien2k[7], pour le cubique non magnétique (NM) et le cubique magnétique (FM). Le potentiel d'échange et de corrélation est traité dans le cadre de l'approximation de gradient généralisé (GGA) paramétrée par Perdew, Burke et Ernzerhof [9]. L'énergie de séparation des états de coeur et des états de valence a été prise égale à -6,0 Ry.

Le processus d'itérations auto-cohérentes est répété jusqu'à ce que l'énergie de convergence soit inférieure ou égale à la valeur de 10^{-4} Ry , en utilisant une énergie de coupure des ondes planes dans la zone interstitielle de sorte que $R_{MT}K_{MAX} = 9$. On a utilisé une densité de maillage k de $14 \times 14 \times 14$ donnant lieu à 3000 points K dans la première zone de Brillouin pour arriver à une convergence acceptable.

Les rayons Muffin-tin (RMT) sont exprimés en unités atomiques (Tableau I.2). Il est important de mentionner que les valeurs des Rmt que nous avons utilisées pour Fe, V et Sn sont choisies de manières judicieuses de telle façon qu'ils répondent aux deux critères suivants

- 1- Assurer l'intégration de la majorité des électrons du cœur dans la sphère (Muffin-tin).
- 2- Évitez le chevauchement des sphères (Muffin-tin).

III.4.Propriétés structurelles et optimisation

La détermination des propriétés structurelles pour le composé Half-Heusler FeVSn est une étape fondamentale dans tout calcul intégrant un calcul ab-initio. Leur détermination nous donne plus d'informations sur les propriétés du matériau à étudier et ce, avant d'accéder aux autres propriétés physiques (électronique, magnétique, etc.).

Les propriétés structurelles de l'état fondamental du demi-Heusler FeVSn ont été déterminées par ajustement de la courbe d'énergie totale en fonction du volume.

Afin de trouver l'état fondamental du système, nous procédons à un calcul d'optimisation de la structure cubique C1b avec le groupe spatial F-43m (SG N°

216) dans les deux cas (magnétique et non magnétique), Un calcul self consistant (SCF) de l'énergie totale en fonction du volume est nécessaire, utilisant l'équation de Murnaghan[10] , intégrée dans le code Wien2k

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

Où

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

- E0 et V0 étant l'énergie et le volume d'équilibre de la maille élémentaire.
- .- B' et B sont respectivement la dérivée première du module de compression et sa valeur à l'équilibre
- Le module de compression B est déterminé par :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2}$$

La figure III.3, nous montre le tracé des deux courbes non magnétique (NM) et magnétique (FM) sur le même tableau et ce, dans le but de comparer les deux phases. La figure nous révèle que la phase FM est la plus stable, cette dernière est en dessous de celle de NM.

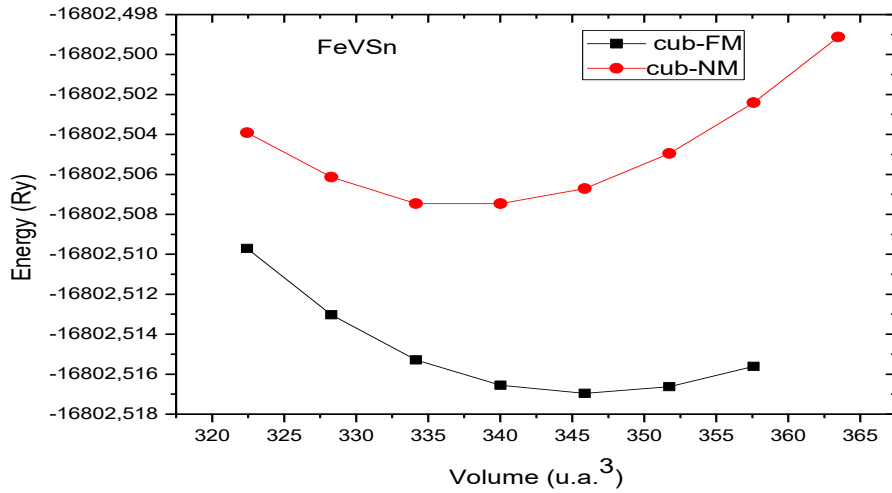


Figure.III.3: représente les courbes d’optimisation de l’énergie totale en fonction du volume pour les cubiques (NM) et (FM)

- La suite des calculs de notre étude se fait uniquement sur la phase magnétique (FM) pour la matériau FeVSn.

Une fois les valeurs de E_0 et V_0 déterminées, il est possible connaître la valeur a_0 correspondant au paramètre de la maille primitive, le module de compression B et sa dérivée B' . la valeur de a_0 est déterminée à partir de l’expression $a_0=(4v_0)^{1/3}$

Le tableau III.1, regroupe les résultats et les valeurs obtenues pour le paramètre de maille d’équilibre, la dérivée première du module de compression B' et son module de compression B le composé Half-Heusler FeVSn

FeVSn Cubique magnétique.	$a_0(\text{Å})$	B (GPa)	B'
Expérimental[11]	5,93	/	/
Calculé	5,89	110,1467	4,7040
Théorique[12]	6,13	/	/

Tableau.III.1 : Energie d’équilibre E_0 , volume V_0 à l’équilibre, paramètre de maille a_0 , module de compression B et sa dérivée B'

Suite aux calculs réalisés, on peut dire que les résultats obtenus par la FP-LAPW après comparaison avec les valeurs théoriques et expérimentales existantes dans la littérature, qu'ils sont en parfaite accord concernant le paramètre de maille a_0 .

III.5. Propriétés électroniques

III.5.1. Densité d'état (D.O.S) :

La connaissance de la densité d'état d'un matériau est indispensable pour la compréhension du matériau, elle nous donne des informations sur la distribution concernant la contribution des différents orbitales des atomes qui constituent ce composé, la densité d'états électroniques quantifie le nombre d'états électroniques possédant une énergie donnée dans le matériau étudié, elle permet également de connaître la nature des liaisons chimiques dans un matériau ainsi que le transfert de charge entre les orbitales et les atomes.

La Figure III .4 représente la courbe de la densité totale (TDOS) et partielle (PDOS) et ce, pour les deux canaux de spin (up et down) de notre composé. Le niveau de fermi est pris comme référence, représenté par une ligne pointillée verticale.

Le tracé du TDOS ne présente pas de symétrie pour le spin up et down, ce la confirme l'existence d'un moment magnétique total non nul, par conséquent notre matériau n'a pas un caractère antiferromagnétique d'autre part, on remarque la présence des états électroniques au niveau de Fermi dans le cas des électrons de spin minoritaires, cela démontre que le système présente un caractère métallique.

Le tracé des densités partielles (PDOS) montre que le composé FeVSn est caractérisé par une forte contribution de l'état d du Fe entre -2eV et +2eV caractérisée par un pic pour les spins majoritaires au voisinage de -2eV et une contribution de l'état d du V, moins accentuée que celle du Fe et présentant un pic au voisinage de 1,5eV pour les spins majoritaires mais moins important que celui du Fe, enfin une très faible contribution des états électroniques p du Sn pour les spins majoritaires et minoritaires entre -5eV et +8eV, cette faible présence est trahi par la présence de son moment magnétique $\mu(Sn)$ de valeur très faible figurant dans le Tableau.III.2 .

La polarisation P de spin d'un composé demi-Heusler au niveau de Fermi (E_F) peut être définie comme

$$P = \frac{\rho \uparrow(E_F) - \rho \downarrow(E_F)}{\rho \uparrow(E_F) + \rho \downarrow(E_F)} \cdot 100$$

$\rho \uparrow(E_F)$ et $\rho \downarrow(E_F)$ représentent les densités d'état résolues au niveau de Fermi (E_F) respectivement pour les spins majoritaires et minoritaires

Dans notre cas on peut lire sur le graphe (TDOS):

$$P = \frac{0,5391 - 1,3503}{0,5391 + 1,3503} \cdot 100 = 42,93\%$$

Puisque la polarisation n'est pas égale à 100%, alors on peut affirmer avec certitude que notre composé est métallique.

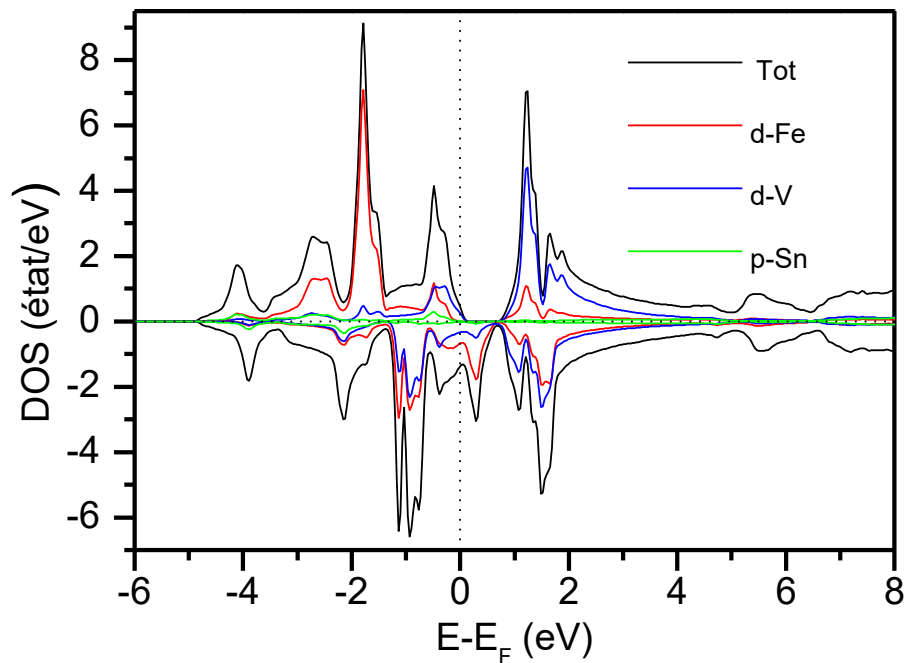


Figure.III .4. Représente la densité totale (TDOS) et partielle (PDOS) des spins minoritaires et spins majoritaires du composé FeVSn dans la phase cubique Magnétique.

III.6. Propriétés magnétiques :

Suite aux résultats obtenus après optimisation, notre étude s'est focalisée sur la phase magnétique de notre matériau, ce qui nous a permis de déterminer les valeurs des moments magnétiques totaux au niveau de chaque atome de notre composé. Les résultats trouvés sont donnés dans le tableau .III.2

Moments magnétiques ⁶	Calculés	Expérimental	Théoriques[12]
Moment magnétique total $\mu_B(FeVSn)$	0,96283	0,98	1,00
Moment magnétique : $\mu_B(Fe)$	1,59250	/	1,400
Moment magnétique : $\mu_B(V)$	-0,62158	/	-0,410
Moment magnétique : $\mu_B(Sn)$	0,02327	/	0,011
Moment magnétique interstitiel $\mu_B(int)$	-0,03136	/	/

Tableau.III.2 : Représente les moments magnétiques total et partiel (calculée en magnétons de Bohr) du composé FeVSn dans la phase cubique magnétique.

Sur le tableau.III .2, on peut constater que le moment magnétique total calculé $\mu_B(FeVSn) = 0,96283$ est un nombre non entier, ce qui nous amène à conclure que notre composé est métallique sur les deux canaux (up et dn). Il est évident de constater que la somme des moments magnétiques de chaque élément composant le matériau Fe, V et Sn est un nombre positif $\sum \mu_B^i = 0,99419$.

En plus, le moment magnétique d'un des éléments est négatif, dans notre cas c'est $\mu_B(V) = -0,62158$, cela suffirait pour affirmer que notre matériau est de nature ferrique.

III.6.1. Structure de Bande

La structure de bande nous donne des renseignements concernant l'occupation énergétique des électrons dans un cristal, elle délimite avec précision les bandes d'énergie permises, grâce à ces résultats, on peut déterminer la nature du matériau étudié. Par conséquent, il est possible de faire la distinction entre un isolant, un semi-conducteur, un métal et un conducteur selon la répartition des bandes.

La structure de bande électronique des spins majoritaires et des spins minoritaires du composé FeVSn dans la phase cubique ferromagnétique est respectivement représentée sur les figures. III.5 et III.6

Les résultats nous révèlent par observation des figures III.6 (up) et III.5(dn) que les bandes de valence et de conduction pour le matériau FeVSn suivants les spins majoritaires et minoritaires se chevauchent, ces résultats ne font que confirmer nos résultat trouvés sur les densités d'états concernant la nature métallique du matériau

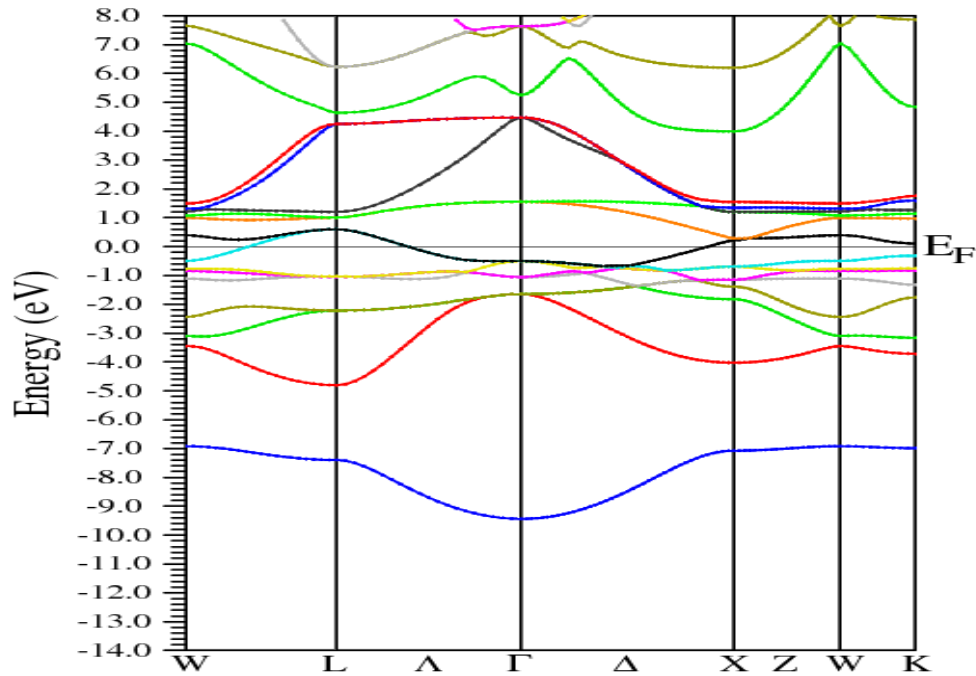


Figure. III.5: structure de bande pour le matériau FeVSn pour le spin-dn

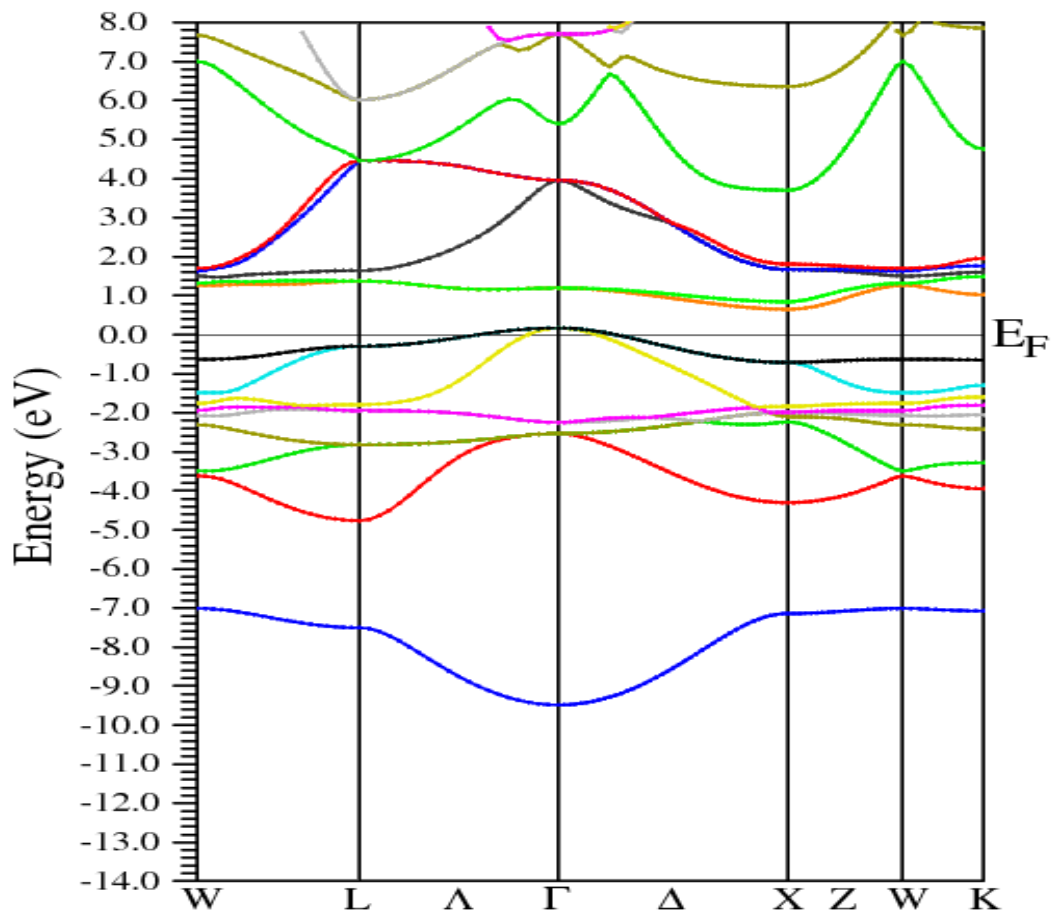


Figure. III .6 : structure de bande pour le matériau FeVSn pour le spin-up

III.7. Conclusion générale et perspectives :

L'étude est menée sur le matériau FeVSn, utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) s'appuyant sur la méthode FP-LAPW, intégrée dans le code Wien2k, concernant certaines propriétés physiques, telles que les propriétés électroniques et magnétiques. Les calculs ont été effectués en considérant l'énergie d'échange et l'énergie de corrélation par l'approximation du gradient généralisé GGA.

En premier lieu, on s'est intéressé à la détermination de l'état fondamental du composé FeVSn par optimisation de l'énergie fondamentale en fonction du volume. Les résultats ont montré que l'état cubique ferromagnétique (FM) est l'état le plus stable,

La suite de notre étude s'est focalisée sur l'état (FM). Par la suite, la détermination du paramètre de maille nous a donné un résultat satisfaisant, vu qu'il est en accord avec les résultats théoriques et expérimentaux.

Le calcul de la densité d'état électronique totaux (TDOS) et partielle (PDOS) et la structure de bande ont montré que le composé FeVSn est de nature métallique

En fin, après calcul du moment magnétique total et les moments magnétiques de chaque élément du composant FeVSn, il s'est révélé que le moment magnétique total est un nombre non entier, ce qui confirme que le matériau est métallique. En plus, le moment magnétique de l'élément Vanadium est négatif, cela suffirait pour affirmer que notre matériau est de nature ferrique

Il est fort et intéressant qu'une étude plus poussée, orientée sur les propriétés physiques du matériau Half-Heusler FeVSn soit mise en œuvre afin de bien exploiter ses performances dans le domaine technologique

Il est souhaitable qu'un calcul par d'autres méthodes soit réalisé pour confirmer et avoir des résultats plus précis en utilisant des algorithmes plus élaborés et des machines de calcul plus performantes. Aussi, il est souhaitable qu'un complément de résultats expérimentaux soit réalisé afin de confirmer les résultats déjà obtenus.

Enfin, une étude des propriétés élastiques, thermiques pour mieux connaître la nature du matériau, un calcul phononique est nécessaire pour confirmer la nature cubique du matériau.

Références:

- [1] : P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey, *Comput. Phys. Commun.* 59, 399 (1990).
- [2] :P. Blaha, K Schwarz , G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *Wien2k, An Augmented Plan Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Techn. Universitat, Vienna, Austria, 2001, ISBN 3-9501031-1-2.
- [3] :R.M. Ceperly and B.J.Provincia, *Plenum*, New York (1985).
- [4] :J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, *Phys. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [5] :J. C. Slater, *Phys. Rev.* 51,846 (1937).
- [6] : J. C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry* 1. 35 (1937).
- [7] :User's guide, wien2k 12.1 Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz (release 30.08.2012).
- [8] :P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. K. vasnicka and J. Luitz, *WIEN2K*, 3, 1 (2001)
- [9] :P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* 136, 864 (1964).
- [10] : D. M. Ceperley , B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* 45, 566 (1980).
- [11] : C. S. Lue, Y. Öner, D. G. Naugle, and Joseph H. Ross, Jr, *Magnetism of New Semi-Heusler Compounds FeVSn and CoVSn*, *Phys. Rev.* VOL. 37, NO. 4, JULY 2001 .
- [12] : MUHAMED ATIFSATTAR ,investigation of structural électronique and magnetic properties of the half –metallic ferromagnetic materials, mémoire doctorat of philosophy in physique, p67, 2018