

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 :

TIKOUR Mohammed El Amine

THEME :

**Contribution à l'étude des propriétés physique de
l'alliage Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$**

Soutenu le :

Devant le jury composé de :

MESKINE Said	MCA	Université de Mostaganem	Président
ABBES Charef	MCA	Université de Mostaganem	Examinateur
ABBASSA Hamza	MCA	Université de Mostaganem	Encadrant

Année Universitaire 2020-2021

Résumé :

Dans ce mémoire, on présente une étude théorique sur les composés Heusler Co_2MnSi et Co_2MnGe ainsi que leurs alliages, à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code wien2k, dont notre choix été basé sur l'approximation de gradient généralisée (GGA).

L'analyse des structures de bande, de la densité des états, de l'énergie totale et des moments magnétiques montre que les composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) présentent un caractère ferromagnétisme demi-métallique. Selon ces caractéristiques, les composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ peuvent être des bons candidats pour les applications spintroniques.

Mots-clés : spintronique, Heusler, DFT, demi-métallique, propriétés magnétiques.

Abstract:

In this thesis, we present a theoretical study on the Heusler compounds Co_2MnSi and Co_2MnGe as well as their alloys using the density functional theory (DFT) implemented in the wien2k code, of which our choice was based on the generalized gradient approximation (GGA).

The analysis of the band structures, the density of the states, the total energy and the magnetic moments shows that $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ and 1) Heusler compounds have a semi-metallic ferromagnetism character. Based on these characteristics, $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ can be a good candidates for spintronics applications.

Key words: Heusler, DFT, spintronic, magnetic moment, semi-metallic.

ملخص:

في هذه المذكرة ، نقدم دراسة نظرية على للمركبات Co_2MnSi و Co_2MnGe باستخدام نظرية (DFT) المطبقة في برنامج المحاكاة wien2k ، حيث تم اختيار نموذج (GGA) . تُظهر تحليلات الخصائص الإلكترونية والطاقة الإجمالية والعزوم المغناطيسية أن للمركبات Co_2MnSi و Co_2MnGe تكتسب الخاصية النصف معدنية وهذا ما يجعلها مرشحة قوية لتطبيقات السبينترونيك. **كلمات مفتاحية:** هسلر ، السبين الإلكتروني، العزم المغناطيسي، نصف معدن، المبدأ الأول.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

✓ A mes plus chers parents.

✓ A mes chères sœurs et mes chers frères.

✓ A mes chères amies.

*✓ Et à tous ceux qui ont contribué à la réalisation
de ce travail.*

Remerciements

Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de m'avoir donnée la force, le courage et la volonté d'accomplir ce travail.

*J'exprime ma gratitude remerciement à mon encadrant Monsieur **Hamza ABBASSA** maître de conférence à l'université de Mostaganem, de m'avoir encadré et pour ces conseils qui m'ont été d'une grande utilité et d'une clairvoyance inouïe dans la rédaction de ce mémoire.*

Je remercie également le jury

J'exprime enfin mes vifs remerciements à tous mes aimées.

Liste des figures

Figure N°	Titre de la figure	Page
I.1	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	5
I.2	structure de demi-Heusler (Half-Heusler)	6
I.3	structure de Heusler (<i>Full-Heusler</i>)	7
I.4	structure d'Heusler quaternaire	9
I.5	:les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.	11
I.6	les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique	12
II.1	Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères I et II de rayons muffin-tin R_I et R_{II} respectivement	19
II.2	: Organigramme d'un calcul auto-cohérent dans une méthode basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique DFT.	21
II.3	L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé Co_2MnGe en fonction du volume de maille.	24
II.4	L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé Co_2MnSi en fonction du volume de maille.	24

II.5	L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,25}\text{Ge}_{0,75}$ en fonction du volume de maille.	25
II.6	L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ en fonction du volume de maille.	25
II.7	L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ en fonction du volume de maille.	26
II.8	Variation du paramètre de maille des alliages Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ en fonction du rapport de concentration x ($0 \leq x \leq 1$).	27
II.9	Les densités d'états totales et partielles de composé Co_2MnGe .	31
II.10	Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$	32
II.11	Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$	32
II.12	Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$	33
II.13	Les densités d'états totales et partielles de composé Co_2MnSi	33
II.14.a	La structure de bande du composé Co_2MnGe (spin-up)	36
II.14.b	La structure de bande du composé Co_2MnGe (spin-down)	36
II.15.a	La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$ (spin-up)	37

II.15.b	La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$ (spin-down)	37
II.16.a	La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$ (spin-up)	38
II.16.b	La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$ (spin-down)	38
II.17.a	La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$ (spin-up)	39
II.17.b	: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$ (spin-down)	39
II.18.a	La structure de bande du composé Co_2MnSi (spin-up)	40
II.18.b	La structure de bande du composé Co_2MnSi (spin-down)	40
II.19	<i>Variation du paramètre de maille a (Å) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).</i>	44
II.20	<i>Variation du module de compressibilité B (GPa) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).</i>	44
II.21	<i>Variation du coefficient de dilatation thermique α ($10^{-5} \cdot \text{K}^{-1}$) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).</i>	45
II.22	<i>Variation de la chaleur spécifique C_v ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).</i>	45

Liste des tableaux

Tableau N°	Titre du tableau	Page
I.1	Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$.	6
II.1	: Les valeurs des R_{MT} pour chaque atome des composés Co_2MnSi , Co_2MnGe et leurs alliages.	22
II.2	L'énergie totale (eV), paramètre de maille $a(\text{Å})$, module de compressibilité B (GPa), et sa première dérivée B' des alliages $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1)	26
II.3	constantes élastiques C_{ij} en (GPa) à pression nulle pour $ZnSe$.	30
II.4	: La polarisation du spin au niveau de Fermi des composés $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).	34
II.5	L'énergie de gap E_g (eV) des composés $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).	41
II.6	Le moment magnétique total et local en (μ_B) des composés $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1)	42

Sommaire

Introduction Générale	Erreur ! Signet non défini.
Introduction générale	Erreur !
Signet non défini.	
CHAPITRE I	Erreur ! Signet non défini.
Les alliages d’Heusler	Erreur ! Signet non défini.
I-1. Introduction	Erreur ! Signet non défini.
I-2. Les alliages d’Heusler :	Erreur ! Signet non défini.
I-2-1. Les alliages semi Heusler	Erreur ! Signet non défini.
I-2-2. Les alliages Heusler (Full-Heusler):	Erreur ! Signet non défini.
I-3. Demi-métallicité des alliages Heusler:	Erreur ! Signet non défini.
I-4. Les applications:	Erreur ! Signet non défini.
I-4-1. Magnéto-résistance Géante (GMR):.....	Erreur ! Signet non défini.
I-4-2. Magnéto-résistance Tunnel:	Erreur ! Signet non défini.
I-5. Conclusion:	Erreur ! Signet non défini.
I.6.	
Bibliographies.....	Erreur
! Signet non défini.	
CHAPITRE II	16
II.1. Introduction	Erreur ! Signet non défini.
II.2. Introduction aux codes de calcul utilisés :	Erreur ! Signet non défini.
II.2.1. Résolution des équations de Kohn-Sham (l’auto-cohérence dans les calculs)	Erreur !
Signet non défini.	
II.3. Détail de calcul :	Erreur ! Signet non défini.
II-4. Les propriétés structurales:.....	Erreur ! Signet non défini.
II.5. Propriétés élastiques et critères de stabilité.	Erreur ! Signet non défini.
II.5. a. Propriétés élastiques :	Erreur ! Signet non défini.
II.5. b. Critères de stabilité :	Erreur ! Signet non défini.

II.6. Propriétés électroniques :.....	Erreur ! Signet non défini.
II.6.a- La densité d'états (DOS) :.....	Erreur ! Signet non défini.
II.6.b- La structure de bande :	Erreur ! Signet non défini.
II.7. Propriétés magnétiques :.....	Erreur ! Signet non défini.
II.8. Propriétés thermodynamiques :	Erreur ! Signet non défini.
I.9.Bibliographies:.....	Erreur ! Signet non défini.
Conclusion générale et perspectives :	Erreur ! Signet non défini.

Introduction

Générale

Introduction générale :

Actuellement, il est possible d'effectuer avec une grande précision des calculs pour différentes grandeurs à travers les méthodes *ab-initio*, tels que l'élasticité, les spectres optiques, les fréquences de vibration du réseau etc... même pour des systèmes très larges. On cite parmi ces méthodes *ab-initio*, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW), c'est l'une des plus précises pour calculer la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Un intérêt tout à fait particulier a depuis longtemps déjà été porté aux alliages Heusler qui sont une base de nombreuses technologies. De ce fait leur rôle dans les futures industries ne cessera de prendre de plus en plus d'importance, et depuis la prédiction de la demi-métallicité de l'alliage NiMnSb par De Groot et *al.* en 1983, l'intérêt scientifique des alliages Heusler a été renouvelé et ces matériaux ont commencé à avoir des intérêts à la fois théoriques et expérimentaux. Plusieurs alliages Heusler ont été ensuite prédits par des calculs *ab-initio* tels que les alliages qui contiennent le Cobalt (Co) et qui sont des candidats prometteurs pour les applications de spintronique du fait que leur température de Curie est élevée.

Le sujet de ce mémoire s'inscrit dans ce domaine : c'est l'étude des propriétés structurales, électriques, magnétiques et thermodynamiques des composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,5; 0,75$ et 1) accompagnée d'une comparaison de leurs propriétés afin d'étudier l'effet de concentration. Ce modeste travail est composé de deux chapitres, l'organisation des ces chapitres est comme suit :

✓ Dans le premier chapitre on présente un rappel sur la classification des alliages d'Heusler, les différents types et les structures cristallines probables .

✓ Dans le chapitre II, nous présentons et discutons les résultats de nos calculs concernant les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques respectivement de ces alliages, sans oublier l'effet de concentrations sur ces propriétés.

Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion générale et perspective.

CHAPITRE I

Les alliages d'Heusler

I-1. Introduction :

Tout a commencé en 1903 avec l'historique découverte de Fritz Heusler, où un alliage avec une formule de type Cu_2MnAl est trouvé comme un matériau ferromagnétique, bien qu'aucun de ces éléments constitutifs ne soit un matériau magnétique [1,2]. C'est la naissance d'une nouvelle classe des matériaux des plus passionnants.

Cette classe de matériaux comprend actuellement une grande collection avec plus de 1000 composés, connus sous le nom de Composés ou alliages Heusler. Une première classe est constituée avec des matériaux ternaires semi-conducteurs ou métalliques avec une stoechiométrie de type 1:1:1 (connus sous le nom demi-Heusler "Half-Heusler"), et une autre classe de type 2:1:1 (connus sous le nom "Full-Heusler") [3].

Dans ce chapitre on va donner quelques notions de base concernant les alliages d'Heuslers, leurs types et leurs propriétés, et on finit cette partie par les applications de ces matériaux en domaine de la spintronique.

I-2. Les alliages d'Heusler :

Les alliages Heusler sont connus depuis plus de 100 ans [4,5], exactement en 1903 quand l'ingénieur Fritz Heusler découvre au cour de son travail sur un alliage contenant du cuivre, du manganèse 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 [3,6,7] et cette découverte donne la naissance d'une nouvelle catégorie des matériaux les plus attirants.

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.1 : 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 [8].

Les alliages Heusler sont des composés ternaires qui peuvent avoir le comportement de demi-métaux, de semi-conducteurs, de supraconducteurs et bien d'autres [9], et ils sont classés en deux grandes familles en fonction de leur composition chimique, où on distingue les alliages Heusler complets (Full-Heuslers) avec une composition X_2YZ , la famille des demi-Heusler (Half-Heuslers) avec une formule chimique XYZ , et la famille des quaternaires Heusler (Half-Heuslers) avec une formule chimique $XX'YZ$.

I-2-1. Les alliages semi 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 [3,8,10].

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 électronégatif comme le Ge, Sn, Sb.

Les alliages demi-Heusler se cristallisent dans une structure cubique non-centrosymétrique (groupe spatial numéro 216, F-43m, $C1_b$) [3] 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 cubique à faces centrées, dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z [11].

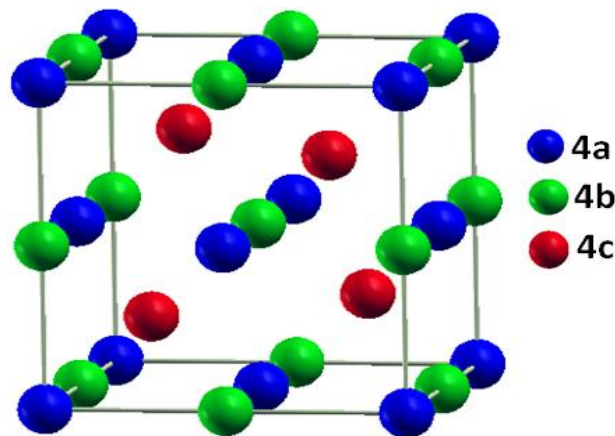


Figure I.2 : structure de demi-Heusler (Half-Heusler)

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

Arrangement	4a	4b	4c
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-2-2. 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 [12].

Ces composés se cristallisent dans la structure cubique dans le groupe d'espace cubique $Fm-3m$ (groupe d'espace N° 225) [3], avec un prototype Cu_2MnAl noté souvent ($L2_1$). 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 au centres des faces.

Cette structure est formée par l'interpénétration de quatre réseaux cristallins cubiques à faces centrées. Deux sous-mailles sont occupées par l'atome X et les deux autres sont occupées par les éléments Y et Z.

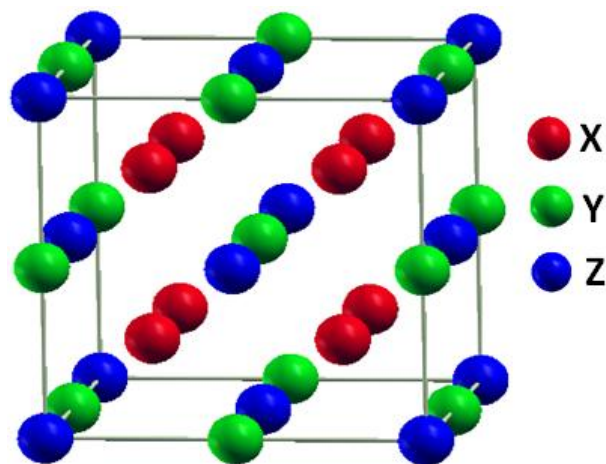


Figure I.3 : structure de Heusler (*Full-Heusler*)

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 [3,8] :

- La phase $L2_1$ de type Cu_2MnAl qui a été expliqué 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 CaF_2 , 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 DO_3 de type BF_3 , les atomes X et Y ou les atomes X et Z sont distribués de façon aléatoire.
- La phase A_2 de type W où tous les sites atomiques sont occupés par hasard par les trois types d'atomes.

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

L'ordre cristallographique a une possibilité de provoquer des modifications significatives sur les propriétés magnétiques des alliages Heusler comme l'aimantation à saturation et la température de Curie.

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 XX'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 [12].

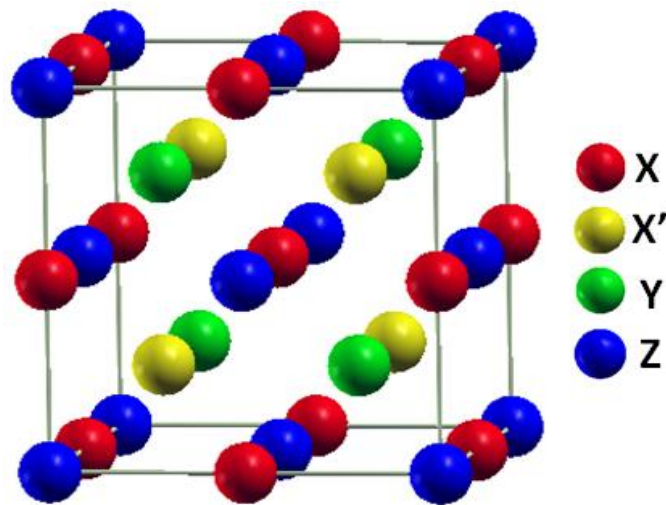


Figure I.4 : structure d'Heusler quaternaire

I-3. Demi-métallicité des alliages Heusler:

De Groot et *al.* ont découvert le concept de demi-métal ferromagnétique par la première fois en s'intéressant au calcul de la structure de bande d'alliages demi-Heusler (NiMnSb) [13]. Conventionnellement, les matériaux ferromagnétiques présentent une densité d'états électronique ($N(E_F)$) au niveau de Fermi pour les électrons de spin majoritaires (*up* : $N_{\uparrow}(E_F)$) et de spin minoritaires (*down* : $N_{\downarrow}(E_F)$).

La polarisation P en spin, qui mesure l'asymétrie en spin, était alors définie par l'expression suivante [14] :

$$P = \frac{N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)}{N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)}$$

La caractéristique ferromagnétisme demi-métallique présente une asymétrie entre les états de spin up et de spin down au niveau de la structure de bandes énergétiques, ce qui résulte des propriétés de conduction totalement différentes entre les spins minoritaires (spin-up) et les spins majoritaires (spin-down).

Exactement, la demi-métallicité s'agit d'un état de la matière où certains matériaux comme les composés d'Heusler montrent des propriétés métalliques pour une direction de spin, tandis qu'ils présentent des propriétés semi-conductrice ou même isolante dans l'autre orientation de spin [12]. Ceci donne lieu à des polarisations des électrons de conduction au niveau de Fermi qui peuvent atteindre les 100%, envisageant alors de forts effets magnétorésistifs (magnétorésistance tunnel et magnétorésistance géante).

I-4. Les applications:

Tout d'abord commencer en 1988, année de la découverte de la magnétorésistance géante par les équipes d'Albert Fert [15] et de Peter Grunberg [16], et pour laquelle le prix Nobel de Physique 2007 leur a été attribué. Cet effet était observé dans une structure composée des multicouches ferromagnétiques et il est réellement le point de départ de la spintronique qui peut se décrire comme une électronique qui contrôle non seulement la charge, mais aussi le spin des électrons, simultanément afin de traiter et sauvegarder les informations.

Le concept 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 en 1936 [17], a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60 [18,19].

Aujourd'hui, le domaine de la spintronique possède des applications très importantes, les plus répandues étant la lecture des disques durs par la magnétorésistance géante (GMR), la magnétorésistance tunnel (TMR: Tunnel Magneto Resistance) et l'écriture des mémoires magnétiques (MRAM : Magnetoresistive Random Access Memories) dans nos ordinateurs.

I-4-1. Magnétorésistance Géante (GMR):

La magnétorésistance est un phénomène qui a été découvert en 1857 par William Thomson elle correspond à la variation de la résistance électrique en présence d'un champ magnétique à la fin des années 1980, soit après 130 ans de recherches théoriques et applications relatives à la magnétorésistance, de tels appareils de mesure, détecteurs, et capteurs ont vu le jour après cette découverte [12].

L'effet GMR est un effet quantique qui est observé dans un empilement de type Ferro/Métal/Ferro [20]. Ces systèmes se composent d'un empilement de deux couches minces ferromagnétiques séparées par une couche conductrice non-magnétique. Les matériaux les plus couramment utilisés pour les électrodes ferromagnétiques sont le Fer, le Cobalt et leurs alliages, tandis que le cuivre et le chrome sont utilisés pour la couche non-magnétique.



Figure I.5 : les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.

L'effet GMR correspond à une différence de résistance électrique suivant l'orientation relative des aimantations dans les deux électrodes où la résistance au passage des électrons d'une électrode à l'autre est plus élevée si les deux électrodes ont leur aimantation antiparallèle l'une par rapport à l'autre que si leur aimantation est parallèle.

I-4-2. Magnéto-résistance Tunnel:

La magnéto-résistance à effet tunnel est une propriété dérivant strictement de la mécanique quantique et elle est similaire à la magnéto-résistance géante. Les premières observations de cet effet ont été faites en 1975 par Julliere [20], ce n'est qu'à partir de 1995, assisté par les travaux de Moodera et al sur des empilements $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{CoFe}$, que la TMR a connu un regain d'intérêt [12].

La TMR a une structure semblable à celle des vannes de spin mais, à la différence que la couche séparatrice est une fine couche de matériau isolant appelée barrière tunnel (par exemple en alumine d'épaisseur 1,5nm) et donc il peut être observé dans les systèmes

Ferro/Isolant/Ferro. Le passage du courant se fait par effet tunnel à travers cette barrière et pour qu'il soit possible l'épaisseur de cette ne doit pas excéder 1 à 2 nanomètre



Figure I.6 : les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique

Des travaux récents ont montré qu'en utilisant des matériaux Heusler comme des électrodes dans des MTJ (jonctions magnétiques tunnels) [21-23], permettent d'atteindre des valeurs élevées de TMR.

La magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel, sont les premières manifestations de la spintronique. Cette découverte a entraîné un bouleversement technologique majeur dans le domaine de la microinformatique.

Cela se reflète évidemment dans le développement de nouvelles architectures de têtes de lecture de disque dur moderne basées sur ce principe qui ont permis d'accroître la densité des disques durs des ordinateurs ce qui augmente leurs capacités de manière immense pouvant atteindre le Téraoctet.

D'autres applications ont vu le jour. Ainsi la MRAM (Magnetic Random Access Memory) a connu un intérêt grandissant car elle offre des caractéristiques intéressantes comme la rapidité, et la non-volatilité de l'information même en l'absence de tension d'alimentation. En effet, les MRAM permettent de remplacer les mémoires DRAM (Dynamic Random Access Memory) dans la mémoire vive des ordinateurs actuels avec des temps d'accès beaucoup plus courts. Et en contrairement aux mémoires DRAM, l'information dans les MRAM n'est plus stockée sous forme de charges électriques mais sous forme de moments magnétiques grâce à la technologie des jonctions magnétiques tunnels.

Ce type de mémoire non-volatile consomme beaucoup moins d'énergie que les mémoires DRAM actuelles car il n'a pas besoin d'un rafraichissement constant des données et ça grâce aux propriétés des alliages Heusler qui possèdent une température de Curie élevée ce qui les rend intéressants, du côté de leur stabilité thermique pour leurs applications dans des dispositifs, donc un atout décisif pour accroître l'autonomie de toutes les applications électroniques, les ordinateurs portables par exemple [3].

I-5. Conclusion:

Dans ce chapitre, nous avons défini les alliages d'Heusler magnétiques qui représentent une catégorie importante des matériaux magnétiques et qui possèdent de nombreux avantages et qui peuvent bien s'adapter à des technologies actuelles, surtout dans le domaine de la spintronique depuis la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance à effet tunnel (TMR).

Les utilisations fournies par les matériaux magnétiques prédominent tous les domaines de notre vie quotidienne notamment le terrain de l'industrie des dispositifs informatiques grâce à leurs propriétés diverses qui sont presque la base de toutes les applications dans les dispositifs modernes. Le développement technologique s'améliore rapidement de jour en jour dans ce domaine.

I.6. Bibliographies:

- [1] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG **5** (1903) 220.
- [2] F. Heusler, Verh DPG **5** (1903) 219.
- [3] H. ABBASSA, « *Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler* », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [4] A. Kellou, N. E. Fenineche, T. Grosdidier, H. Aourag, C. Coddet, Journal of applied physics, Vol 94, No **5**, (2003).
- [5] Xinlin Yan, A. Grytsiv, P. Rogl, V. Pomjakushin, M. Palm, Journal of Phase Equilibria and Diffusion, Vol. **29**, No **6**, (2008).
- [6] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG **5** (1903) 220.
- [7] F. Heusler, Verh DPG **5** (1903) 219.
- [8] H. ZENASNI, « *Etude théorique des propriétés magnétique électroniques et structurales des alliages Heusler* », Université de Tlemcen, Thèse (2013).
- [9] 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).
- [10] S. Sakurada, N. Shutoh, Appl Phys Lett **86** (2005) 082105.
- [11] P.J. Webster, K. R. A. Ziebeck, Landolt-Börnstein - group III condensed matter, vol. 19C. Berlin: Springer; **19** (1988) 75-184.
- [12] D. BENTAIFOUR, « *Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire $NiCoMnGe_xSn_{1-x}$* », Université de Mostaganem, Mémoire de Master (2017).
- [13] R. A. de Groot and F. M. Mueller, « *New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets* » Phys. Rev. Lett, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. (1983).
- [14] M. Hehn, F. Montaigne, and A. Schuhl, « *Magneto-resistance géante et électronique de spin* », Techniques de l'Ingenieur l'expertise technique et scientifique de référence, 10-Nov-2002.
- [15] M. N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, Phys Rev Lett **61** (1988) 2472.
- [16] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, Phys Rev Lett **57** (1986) 2442.

- [17] N. F. Mott, *Prac Roy. Soc.* **A153** (1936)699.
- [18] A. Fert et I.A. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **21** (1968) 1190, *J. physique* **32** (1978), C1 46, *J. phys. F.***6**(1976)849.
- [19] B. Loegel et F. Gautier, *J. phys. Chem. Sol.***32**(1971) 2723
- [20] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, *Angew. Chem.* 2007, 119, 680; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46** (2007), 668.
- [21] K. Inomata, S. Okamura, R. Goto, N. Yezuka, *Jpn J Appl Phys* **42** (2003) L419.
- [22] S. Kämmerer, A. Thomas, A. Hütten, G. Reiss, *Appl Phys Lett* **85** (2004) 79.
- [23] C. Herbot, E.A. Jorge, M. Jordan, *Appl Phys Lett* **94** (2009) 142504.

Chapitre II

Résultats et discussions

II.1. Introduction :

Dans le but de calculer les propriétés et paramètres d'équilibres d'un tel matériau, plusieurs méthodes ont été employées, telle que l'expérimental dite empirique et qui s'appuie sur l'expérience, c'est à dire l'observation et non pas la théorie. Cette méthode reste jusqu'à maintenant difficile et très couteuse et n'est disponible dans plusieurs laboratoires (pays du tiers monde), et de ce fait plusieurs méthodes sont développées jusqu'à maintenant, comme : les méthodes théoriques qui sont basé sur la simulation numérique, telle que les méthodes semi-empiriques et les méthodes du premier principe ou *ab-initio*. Pour les méthodes semi-empiriques, ils sont basées sur des données ajustées par des résultats expérimentaux pour de simplifier les calculs. Les méthodes qui ne se basent sur aucun paramètre empirique ou semi-empirique et qui dérivent directement des principes théoriques, sont appelées méthodes *ab-initio*.

Dans ce mémoire, on va réaliser une étude *ab-initio* pour discuter les propriétés structurales, électroniques, élastiques et thermodynamiques des composés Heusler Co_2MnSi et Co_2MnGe avec leurs alliages, cette étude sera basée sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) avec la méthode *FP-LAPW* implémentée dans le code Wien2k.

II.2. Introduction aux codes de calcul utilisés :

Dans ce travail, nos calculs sont effectués en utilisant le code de modélisation numérique appelé Wien2k qui a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz de l'Institut de Chimie des Matériaux de l'Université Technique de Vienne (Autriche), la première apparition de ce code était en 1990 [1], il s'agit d'un code de calcul *ab-initio* qui fait partie d'un ensemble de logiciels de simulation numériques. Par la suite, ce code a été continuellement révisé avec plusieurs mises à jour. Des versions du code Wien original ont été développées (appelées, selon l'année de leur édition, Wien93, Wien95, Wien97, Wien2k (Wien2000), etc...). Nous avons utilisé la version Wien2k (l'année 2014) qui a subi une amélioration notable, particulièrement en termes de vitesse, d'universalité (multiplateformes), facilité d'emploi, nouveaux dispositifs et de convivialité (interface utilisateur) [2]. Le package Wien2k est écrit en langage FORTRAN90 et fonctionne sous un système d'exploitation UNIX permettant d'effectuer des calculs quantiques sur les solides périodiques. Il est constitué de plusieurs programmes indépendants basés sur la DFT. Le terme d'échange-corrélation figure dans ce code sous la version LDA de Perdew et Wang [3], GGA de Perdew,

Chapitre II :Résultat et discussion

Burke et Ernzerhof [4] et autres. WIEN2k utilise la méthode full-potential (linearized) augmented plane-wave and local-orbitals [FP-(L)APW] pour résoudre les équations de Kohn-Sham.

La méthode des ondes planes linéairement augmentées (LAPW) [5,6] est une procédure destinée à résoudre les équations 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, cela en introduisant des bases qui sont spécialement adaptées au problème. La méthode FP-LAPW s'est avérée performante pour les calculs des propriétés physiques de matériaux qui ne dépassent pas un certain nombre d'électrons. Différentes méthodes de calcul ont été développées, basées sur le formalisme de la DFT. Toutes utilisent le fait qu'il est possible de séparer les états électroniques en deux : les états de cœur, très proches du noyau, fortement liés et les états de valence. Quelque soit l'approche utilisée, ces états sont traités séparément. L'équation de Schrödinger est appliquée aux seuls états de valence. Les états de cœur sont traités soit par un calcul atomique ou bien leur contribution est introduite dans un potentiel effectif qui n'agit que sur les électrons de valence, les électrons de cœur étant ainsi éliminés [7].

Les méthodes de la DFT sont classées en deux grandes catégories : les méthodes "tout électrons" et les approches dites pseudo-potentiels. De même pour les potentiels, il existe deux grandes classes : les potentiels tout électron et les pseudo-potentiels. Dans ce mémoire, on va utiliser la première catégorie, le potentiel peut être total (Full potentiel) dans le sens où aucune approximation n'est utilisée pour sa description. Parmi les méthodes "tout électrons", on compte la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW). C'est la méthode la plus utilisée de sa précision, mais elle est lourde en 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, comme il est illustré dans la figure II.1.

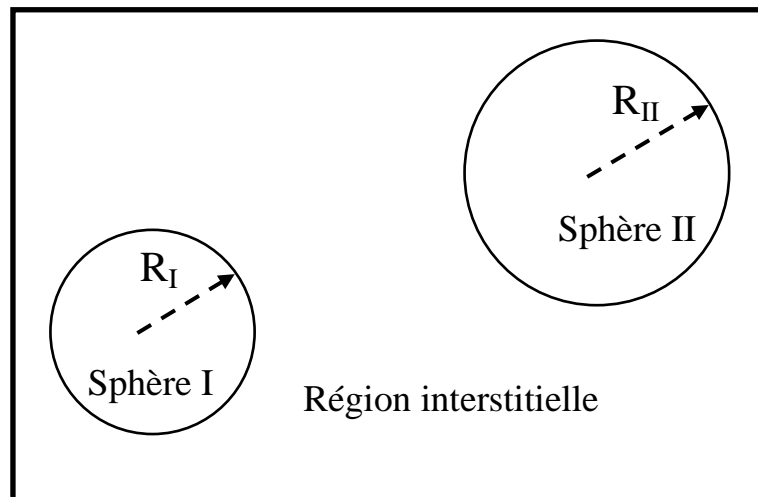


Figure. II.1: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères I et II de rayons muffin-tin R_I et R_{II} respectivement.

La première partie est appelée 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, dans cette région qui est définie par des sphères atomiques (S) centrées sur les sites de rayons R_I (ou $R_{MT(I)}$) et R_2 (ou $R_{MT(II)}$), le potentiel est à symétrie sphérique et les fonctions d'ondes sont des fonctions radiales « solution de l'équation de Schrödinger ».

La deuxième partie 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 sera 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 [7].

Chapitre II :Résultat et discussion

* En utilisant ce code, plusieurs propriétés des matériaux peuvent être calculées, parmi lesquelles on peut citer [8] :

-Les bandes d'énergie, la densité des états.

-La densité d'électrons, la densité de spins et les facteurs de structure aux rayons X.

-L'énergie totale, les forces atomique, les géométries d'équilibre, les optimisations de structure.

-Les gradients de champ électrique, les décalages isométriques, les champs hyperfins.

-La polarisation des spins (structure ferromagnétique, antiferromagnétique ou autres), le couplage spin-orbite.

-Les spectres d'émission et d'absorption aux rayons X.

- Les propriétés optiques.

Dans ce mémoire, nous avons employé un autre code dans le but d'étudier l'effet de la température, il s'agit du code gibbs2, qui est réservé à l'étude des propriétés thermodynamiques.

II.2.1.Résolution des équations de Kohn-Sham (l'auto-cohérence dans les calculs)

La résolution des équations de Kohn-Sham nous donne les coefficients pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. Pour 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 d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent schématisé par l'organigramme de la figure (II.2).

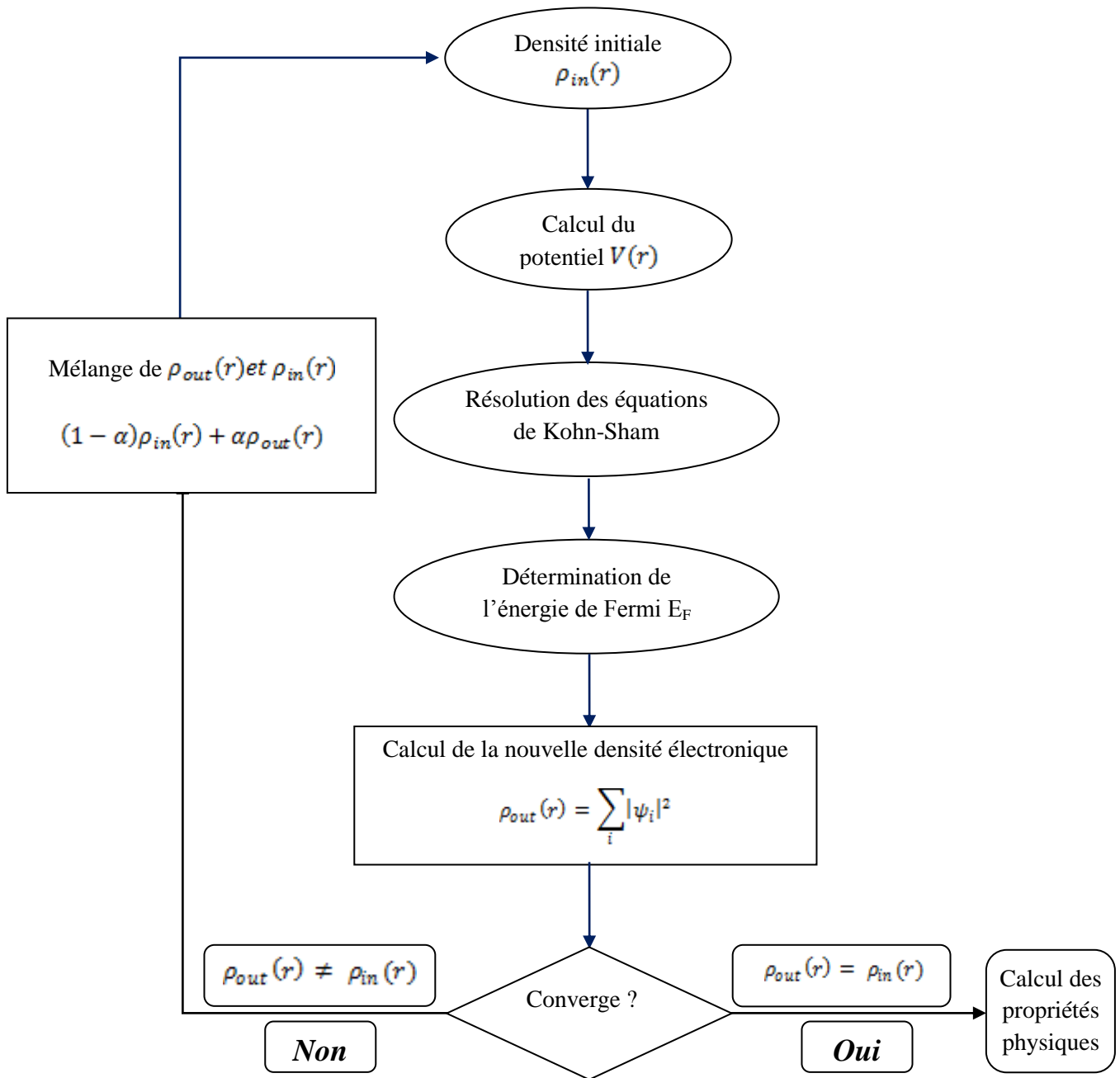


Fig. II.2: Organigramme d'un calcul auto-cohérent dans une méthode basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique DFT.

II.3. Détail de calcul :

Dans ce mémoire, les calculs ont été réalisés en utilisant le code Wien2k [9] qui est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (full-potential linearized augmented planewave ou FP-LAPW) [10] dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le potentiel d'échange et de corrélation est traité dans le cadre de l'approximation du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximation) paramétrisée par Perdew, Burke et Ernzerhof [11], l'énergie de séparation (de coupure) des états de cœur et des états de valence (cut-off) a été prise égale à $-6.0 R_y$. Le processus des itérations self-consistant est répété jusqu'à une énergie de convergence inférieure ou égale à la valeur de $10^{-4} R_y$, nous avons utilisé une énergie de coupure des ondes planes de la zone interstitielle pour que $R_{MT}K_{MAX}= 8$. L'intégration de la zone de Brillouin est réalisée avec 3000 k-points basés sur un maillage de $14 \times 14 \times 14$.

Les rayons de Muffin-tin (R_{mt}), sont donnés en unités atomiques, tableau II.1. Les valeurs de R_{mt} que nous avons utilisé pour Co, Mn, Si et Ge représentent un bon choix pour notre calcul. Ce choix est basé sur deux critères :

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

<i>Elément</i>	<i>Co</i>	<i>Mn</i>	<i>Si</i>	<i>Ge</i>
R_{mt} (u.a)	2,15	2,15	2,00	2,25

Tab. II.1 : Les valeurs des R_{MT} pour chaque atome des composés Co_2MnSi , Co_2MnGe et leurs alliages.

Les propriétés thermodynamiques ont été calculées à l'aide du modèle quasi-harmonique de Debye, implémenté dans le programme de Gibbs2 [12] qui nous a servis principalement à la détermination de tous les paramètres thermodynamiques ainsi l'obtention d'autres paramètres macroscopiques [12,13] en fonction de la température comme, le coefficient de dilatation thermique α , la capacité calorifique à volume constant C_v ...

II-4. Les propriétés structurales:

Afin de déterminer les propriétés de l'état fondamentale tels que le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa première dérivée, nous avons effectué une optimisation de l'énergie totale en fonction du volume pour les deux matériaux parents Co_2MnSi , Co_2MnGe et leurs alliages, les résultats sont obtenus par ajustement de l'énergie totale à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [14].

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

Avec :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'}{B} P \right)^{-1/B'} \quad (\text{II-2})$$

Le module de compressibilité B est défini par :

$$B = V \frac{d^2 E}{dV^2} \quad (\text{II-3})$$

La dérivée première du module de compressibilité B' est déterminée par l'asymétrie de la courbe de l'énergie E .

Le paramètre du réseau à l'équilibre est déterminé à travers la minimisation la courbe $E_{tot}(V)$.

Pour la composés Heusler Co_2MnSi , Co_2MnGe et leurs alliages de concentrations (0,25; 0,50 et 0,75), nous avons calculé et tracé les énergies totales en fonction du volume.

Les figures II.3, II.4, II.5, II.6 et II.7 représente la variation de l'énergie totale du système en fonction du volume pour les matériaux parents Co_2MnSi , Co_2MnGe et leurs alliages $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,25}\text{Ge}_{0,75}$, $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,50}\text{Ge}_{0,50}$ et $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ respectivement.

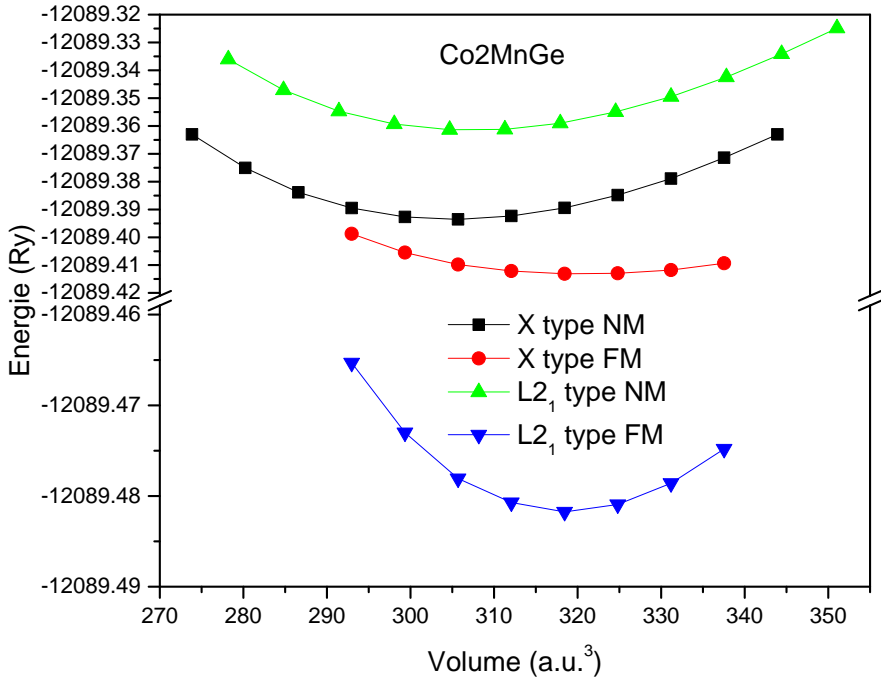


Figure II.3 : L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé Co₂MnGe en fonction du volume de maille.

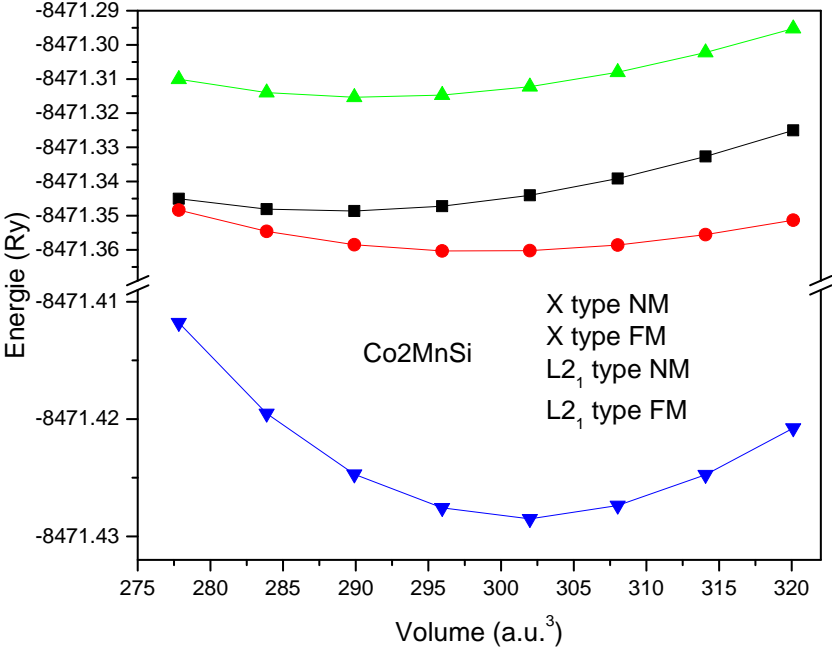


Figure II.4 : L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé Co₂MnSi en fonction du volume de maille.

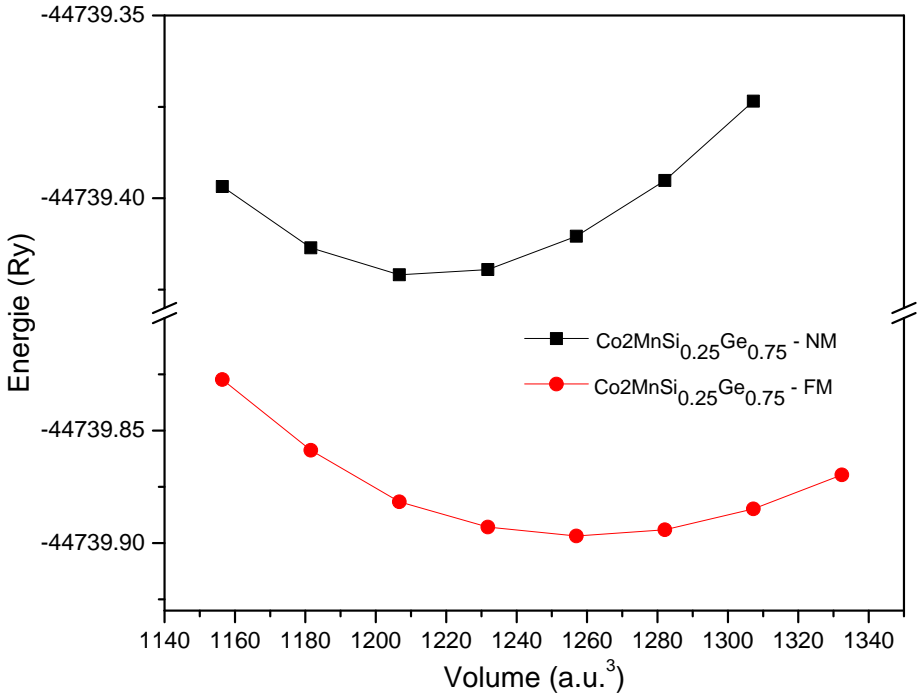


Figure II.5 : L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0.25}\text{Ge}_{0.75}$ en fonction du volume de maille.

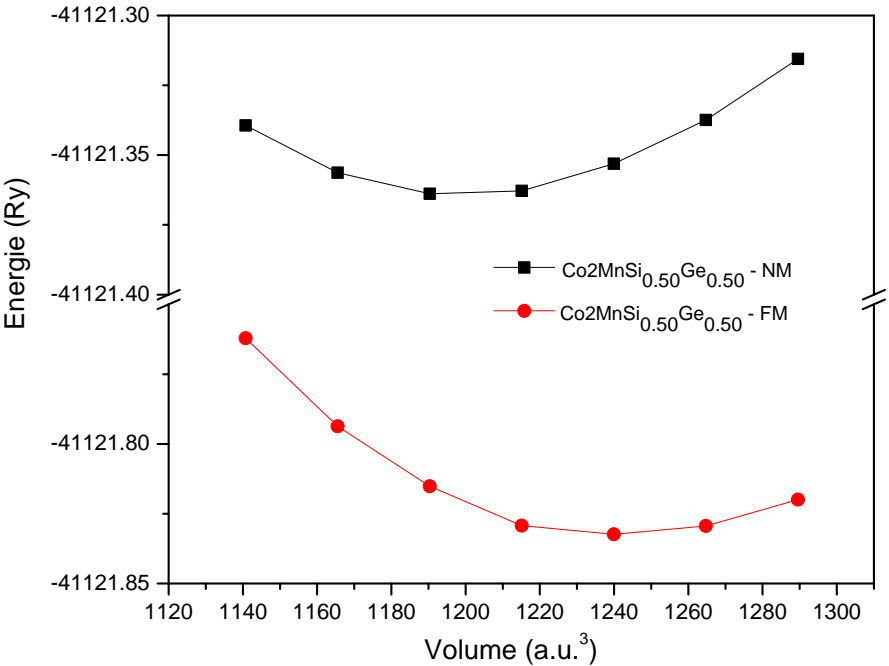


Figure II.6 : L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0.50}\text{Ge}_{0.50}$ en fonction du volume de maille.

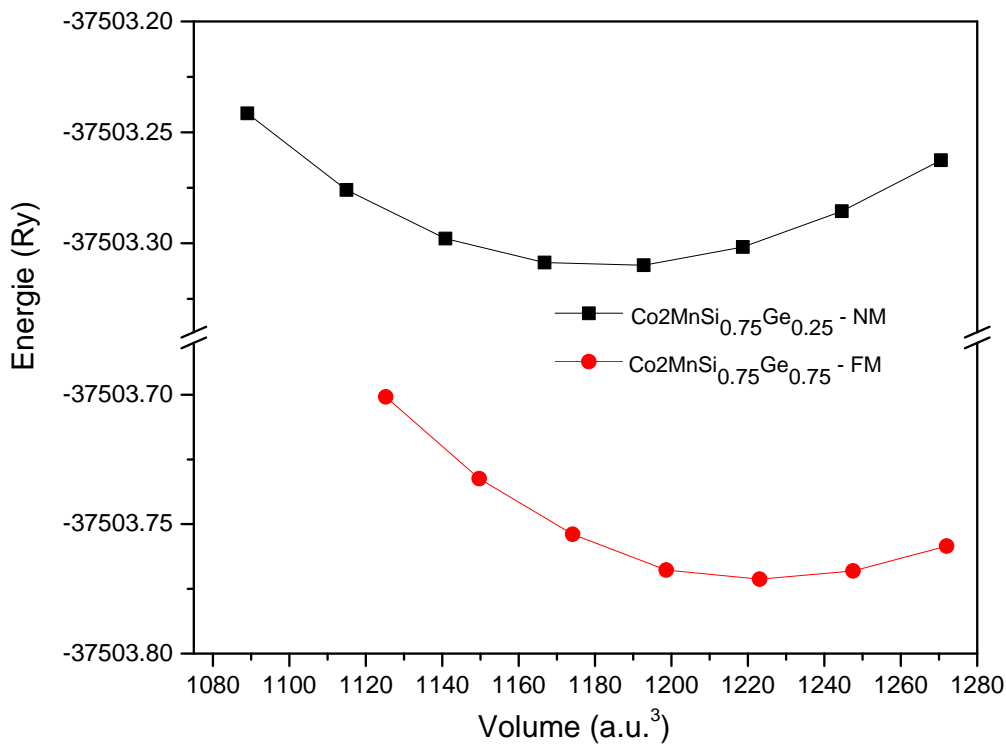


Figure II.7 : L'énergie totale calculée en (eV) pour le composé $\text{Co}_2\text{MnSi}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$ en fonction du volume de maille.

Le tableau **II.2** : regroupe les résultats et valeurs obtenues pour l'énergie totale, le paramètre de maille à l'équilibre, le module de compressibilité ainsi que sa dérivée pour les composés parents Co_2MnGe et Co_2MnSi ainsi que leurs alliages $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$, avec les diverses concentrations 0,25; 0,50 et 0,75.

$\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$		$a_0(\text{Å})$	B(GPa)	B'
Co_2MnSi	Nos calculs (GGA-PBE)	5,633	222,276	4,801
	Expr Ref. [15]	5,651	/	/
	Theo Ref.(GGA-PBE) [16]	5,635	226	/
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$		5,711	207,565	5,478
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$		5,685	221,246	3,664
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$		5,659	225,953	4,076
Co_2MnGe	Nos calculs (GGA-PBE)	5,737	198,004	3,465
	Expr Ref. [15]	5,741	/	/
	Theo Ref.(GGA-PBE) [16]	5,736	188	/

Tableau II.2 : L'énergie totale (eV), paramètre de maille $a(\text{Å})$, module de compressibilité B (GPa), et sa première dérivée B' des alliages $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1)

On remarque que nos résultats sont proches de celles trouvés par d'autre travaux théoriques et expérimentaux pour les composés parents Co_2MnGe et Co_2MnSi , tandis que nous n'avons trouvé aucune valeur expérimentale ou théorique pour leurs alliages dans la littérature.

La figure au dessous (figure II.8) représente la variation du paramètre de maille à l'équilibre en fonction du rapport de concentration x , il est claire que le paramètre de maille varie linéairement en fonction du rapport de concentration x , ce qui confirme l'obéissance de la loi de Veguard par notre alliage..

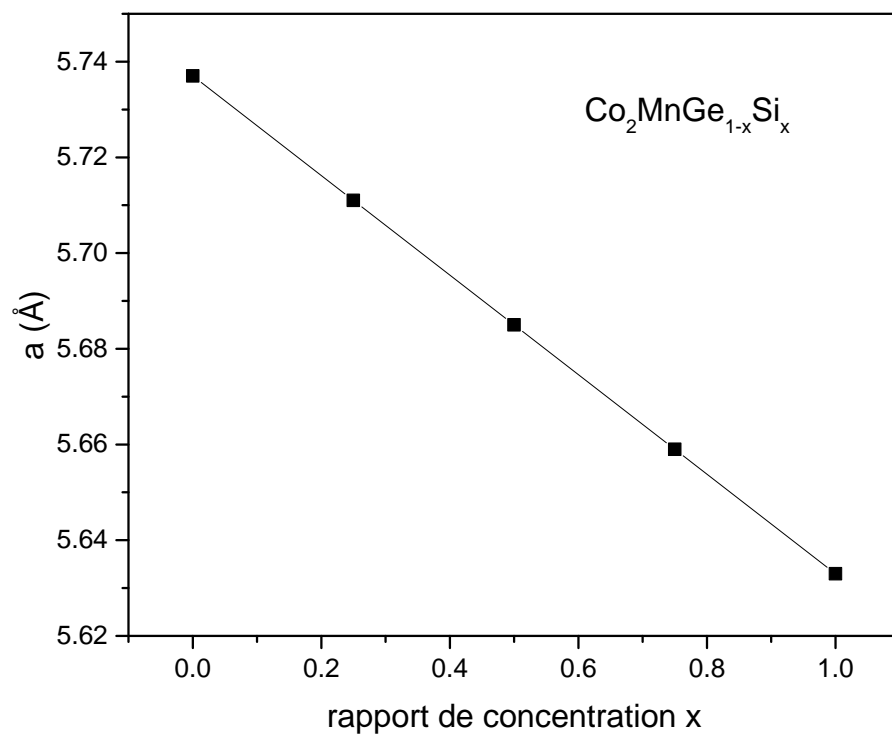


Figure II.8 : Variation du paramètre de maille des alliages Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ en fonction du rapport de concentration x ($0 \leq x \leq 1$).

On peut expliquer cette variation (décroissance) du fait que la substitution d'un atome lourd (Ge) par un atome relativement léger (Si) diminue la taille de la maille.

Cette variation linéaire est très importante, elle nous permet d'étudier les propriétés physiques pour d'autres concentrations (entre 0 et 1) sans passer par l'optimisation de l'énergie totale du système en fonction du volume.

II.5. Propriétés élastiques et critères de stabilité.

II.5. a. Propriétés élastiques :

L'étude des propriétés élastiques est un outil indispensable, et à partir des constantes élastiques on peut tirer une information importante sur les caractéristiques des liaisons entre plans atomiques adjacents, et le caractère anisotrope des liaisons, et aussi sur la stabilité structurale. Elles définissent les propriétés d'un matériau qui subit une contrainte, se déforme et puis revient à sa forme originale après la cessation de la contrainte [7,17].

Un certain nombre de modèles a été proposé dans la littérature pour les calculs effectués par les méthodes du premier principe des modules élastiques (Mehl, Catti , etc) [18].

Dans ce mémoire, nous avons effectué un calcul des constantes élastiques uniquement pour les composés parents Co_2MnSi et Co_2MnGe , et cela est du à nos moyen de calcul. Les deux matériaux parents, se cristallise dans une structure cubique à face centré (c.f.c). Pour ce type de matériau, nous avons utilisé le modèle de Mehl [19-21] afin de déterminer les constantes élastiques C_{ij} .

Pour une structure cubique, le nombre de constantes élastiques se réduit par symétrie à trois constantes indépendantes C_{11} , C_{12} et C_{44} . À travers le modèle de Mehl, nous calculons le module $(C_{11} - C_{12})$ par un tenseur de déformation orthorhombique en volume conservé [7]:

$$\vec{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\delta^2}{(1-\delta^2)} \end{pmatrix}$$

Chapitre II :Résultat et discussion

L'application de cette déformation change l'énergie totale du système de sa valeur au repos (sans déformation) à:

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + (C_{11} - C_{12})V.\delta^2 + O[\delta^4] \quad (\text{II-1})$$

Où $E(0)$ représente l'énergie à l'état fondamentale sans déformation et V est le volume de la cellule élémentaire à l'état d'équilibre.

Pour les coefficients C_{11} et C_{12} , nous avons besoin d'une deuxième équation et un autre tenseur de déformation cubique [7]:

$$\vec{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}$$

L'application de cette déformation change l'énergie totale du système de sa valeur au repos (sans déformation) à:

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + \frac{3}{2}(C_{11} + C_{12})V.\delta^2 + O[\delta^4] \quad (\text{II-2})$$

Pour la troisième constante élastique C_{44} , nous utilisons un tenseur de déformation monoclinique en volume conservé [7]:

$$\vec{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\delta}{2} & 0 \\ \frac{\delta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\delta^2}{(4 - \delta^2)} \end{pmatrix}$$

En remplaçant l'énergie totale :

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + \frac{1}{2}C_{44}V.\delta^2 + O[\delta^4] \quad (\text{II-3})$$

Chapitre II :Résultat et discussion

En utilisant le modèle de Mehl, à pression nulle nous avons obtenu les constantes élastiques pour les deux composés parents Co_2MnSi et Co_2MnGe qui sont rassemblées dans le tableau II.3. Nous avons aussi cité d'autre valeurs trouvées dans la littérature.

$\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Co_2MnSi	365,1164	164,9786	192,1662
Co_2MnGe	350,5691	123,7840	192,3520

Tableau II.3: Les constantes élastiques C_{ij} en (GPa) à pression nulle pour ZnSe.

II.5. b. Critères de stabilité :

Les constantes élastiques C_{ij} d'un tel matériau cubique doivent satisfaire les critères de stabilité suivants [22]:

$$C_{11} > 0,$$

$$C_{44} > 0,$$

$$C_{11} - C_{12} > 0,$$

$$C_{11} + 2C_{12} > 0.$$

Il est claire que nos valeurs calculées pour les constantes élastiques, satisfont les critères de stabilité d'un matériau cubique, ce qui confirme la stabilité structurale de nos composés parents Co_2MnSi et Co_2MnGe à l'état fondamentale.

II.6. Propriétés électroniques :

L'étude des propriétés électroniques d'un matériau est une étape très importante, elle nous permet de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau en question, comme l'énergie de gap et la distribution de charges. Pour les systèmes magnétiques, en utilisant le concept des électrons à *spin-up* et *spin-down* séparément, on effectue les calculs à spins polarisés en procédant à l'analyse des propriétés données par la structure de bande et la densité d'états [7].

II.6.a- La densité d'états (DOS) :

La densité d'états désigne les cites qui sont plus riches ou pauvres en électron, elle se retrouve majoritairement sur les atomes les plus électronégatif, la compréhension de la densité électronique permet mieux trouver les cites électrophiles et nucléophiles dans un molécule. Et La plupart des propriétés de transport sont déterminées à partir de la connaissance de la densité d'états. Elle permet aussi de définir la nature des liaisons chimiques dans un matériau et par conséquent le transfert de charge entre orbitales et atomes.

Les densités d'états totales (DOS) et les densités d'états partielles (PDOS) des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) sont calculées et tracées dans les figures II.9, II.10, II.11, II.12 et II.13, en tenant compte du calcul spin-polarisé.

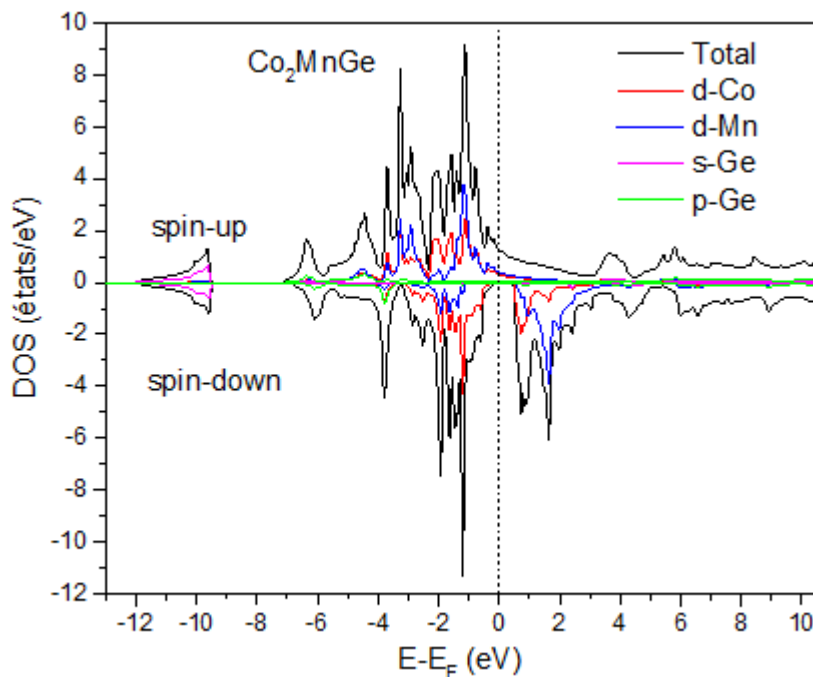


Figure II.9: Les densités d'états totales et partielles de composé Co_2MnGe .

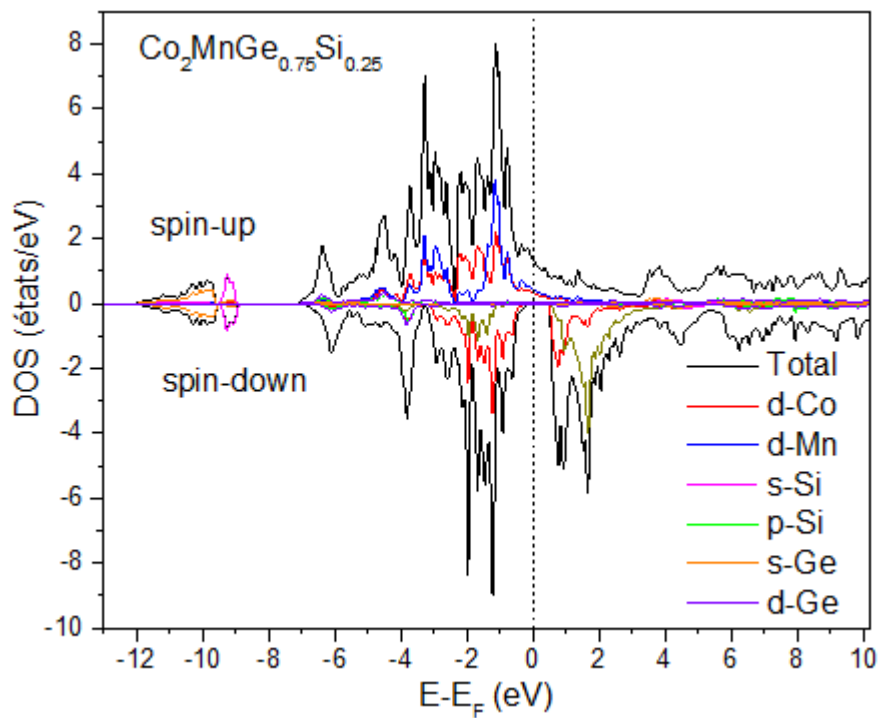


Figure II.10: Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0.75}\text{Si}_{0.25}$

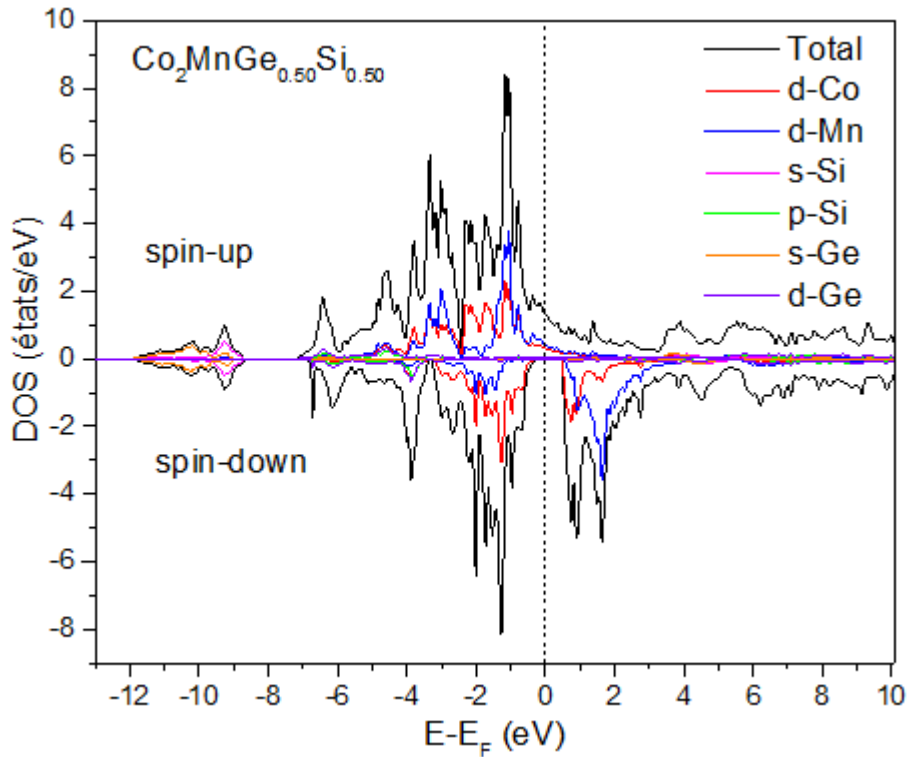


Figure II.11: Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0.50}\text{Si}_{0.50}$

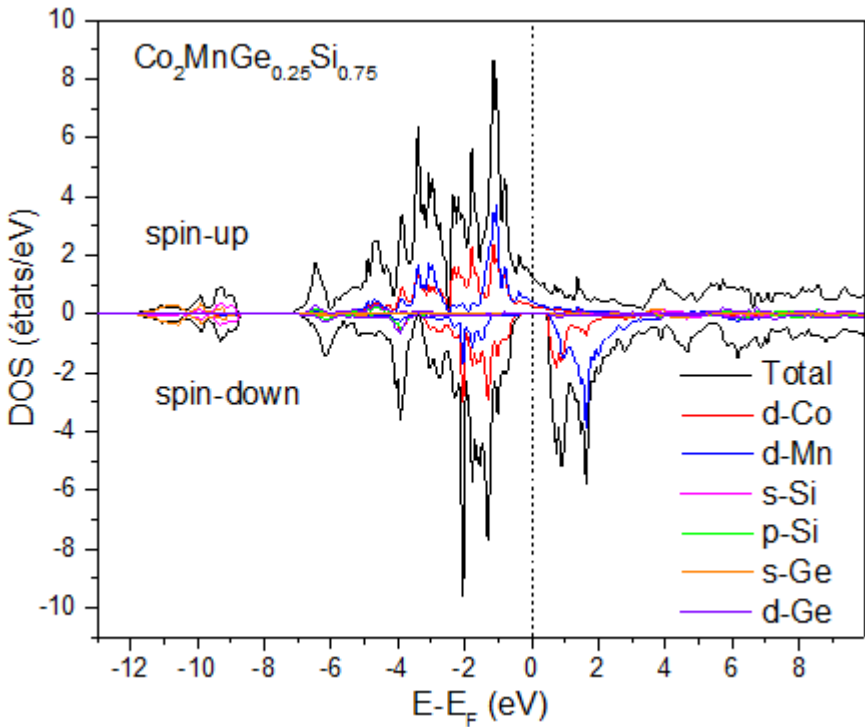


Figure II.12: Les densités d'états totales et partielles de composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$

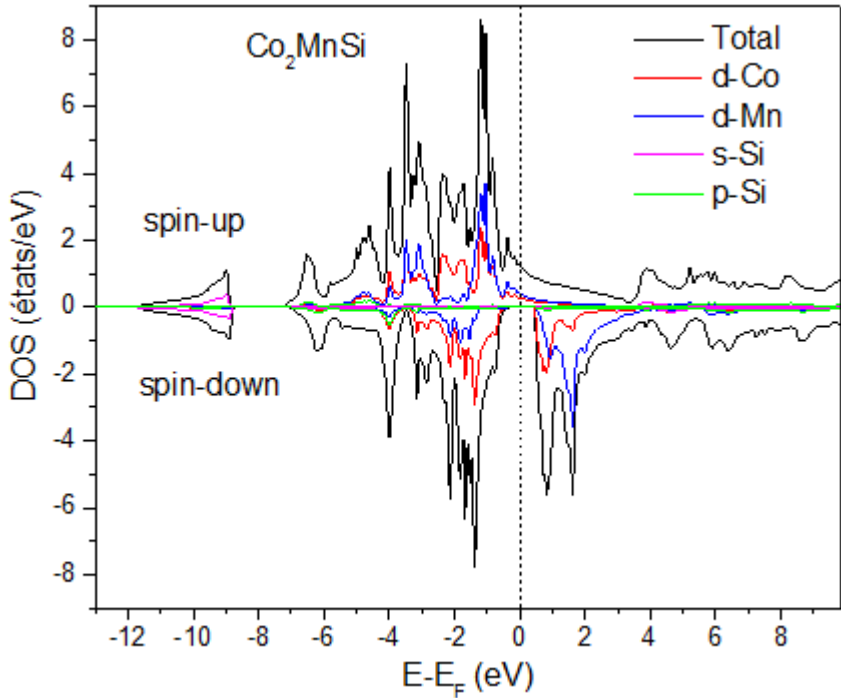


Figure II.13: Les densités d'états totales et partielles de composé Co_2MnSi

Chapitre II :Résultat et discussion

D'après les figures, il est clair que les densités d'états des électrons majoritaires (spin-up) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi pour les cinq concentrations, ce qui confirme leurs caractères métalliques. Tandis que les électrons minoritaires (spin-down) ont une densité d'états totale nulle au niveau de Fermi pour les cinq concentrations, ce qui confirme leurs caractères semi-conducteurs. Ces deux résultats indiquent que nos composés parent, ainsi que leurs alliages sont des matériaux demi-métalliques.

La contribution des différents atomes dans les densités d'états (DOS) est comme suit:

Pour les composés parents Co_2MnSi et Co_2MnGe , au-dessous du niveau de Fermi, les orbitales $3d\text{-Co}$ et $3d\text{-Mn}$ ont une contribution majeure dans la densité d'états totales (DOS) des spins majoritaires (spin-up) et des spins minoritaires (spin-down), tandis que les éléments Si et Ge ont une contribution négligeable dans les deux directions du spin. Au-dessus du niveau Fermi la situation est différente, tous les éléments constituants (dans chaque composé) ont une faible contribution dans la densité d'états totale pour les spins majoritaires, mais dans le cas des spins minoritaires, il est évident que les orbitales $3d\text{-Co}$ et $3d\text{-Mn}$ sont les plus dominants dans la densité d'états totale.

Pour les composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0,25; 0,50$ et $0,75$), on remarque que la situation n'a pas changé, et cela est plus logique du fait qu'on a substitué un élément (Ge) par un autre (Si) dont les deux n'ont presque aucune contribution dans la densité d'états totale, pour les deux orientations du spin.

Les valeurs de la polarisation électronique pour les cinq composés sont calculées par la relation suivante [7]:

$$P(\%) = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \times 100 \quad \text{II-4}$$

$\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$	$x=0$	$x=0,25$	$x=0,50$	$x=0,75$	$x=1$
$P(\%)$	100 ^a	100	100	100	100 ^a
	100 ^b	/	/	/	100 ^b

^aCe travail, ^bRef. [16].

Tableau II. 4: La polarisation du spin au niveau de Fermi des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

Il est clair que le composé Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ garde son caractère demi-métallique pour toutes les concentrations, avec une polarisation en spin totale (100%) au niveau de Fermi.

II.6.b- La structure de bande :

La théorie des bandes est un modèle quantique en physique des solides qui détermine les valeurs possibles que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci de façon générale. Ces électrons n'ont pas la possibilité d'avoir des valeurs énergétiques comprises dans certains intervalles lesquels sont séparés par des bandes d'énergie interdites. Cette modélisation conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure des bandes.

À partir de la forme dans laquelle les bandes sont réparties, il est possible de comprendre et d'expliquer schématiquement les différents comportements entre un isolant, un semi-conducteur, un conducteur et un métal.

Les structures de bandes des alliages $\text{NiCoMnGe}_x\text{Sn}_{1-x}$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) sont illustrées dans les figures en tenant compte du calcul spin-polarisé.

Les structures de bandes des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) sont calculées et tracées dans les figures II.14-a, II.14-b, II.15-a, II.15-b, II.16-a, II.16-b, II.17-a, II.17-b, II.18-a et II.18-b, en tenant compte du calcul spin-polarisé.

On note que les points et directions de haute symétrie ne sont pas les mêmes entre les matériaux parents et leurs alliages, et cela est dû au type de la maille, les composés parents cristallisent dans une structure cubique à face centrée (cfc) tandis que leurs alliages sont constitués par des super-cellules d'une maille primitive.

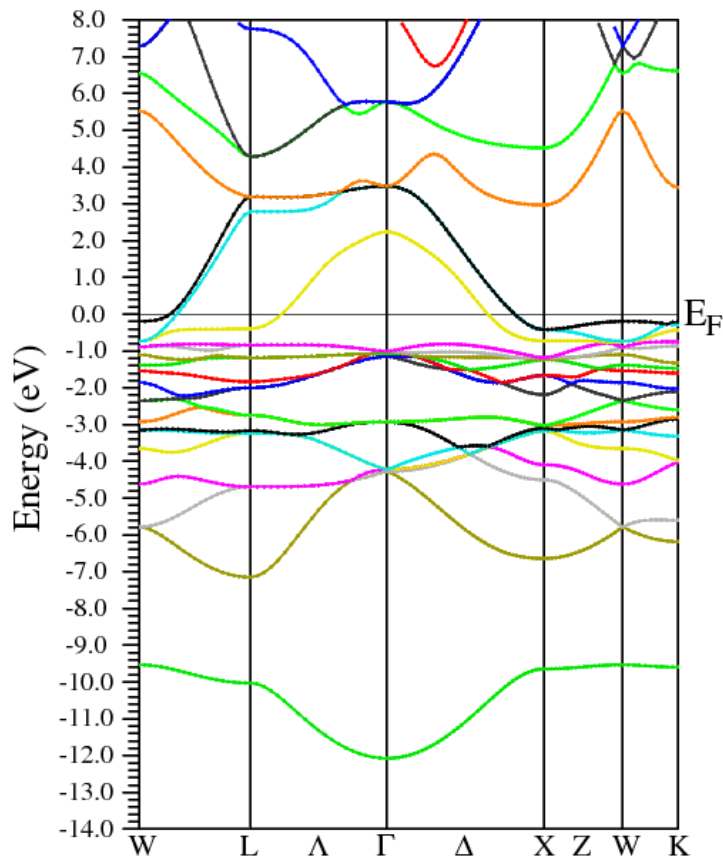


Figure II.14-a: La structure de bande du composé Co_2MnGe (spin-up)

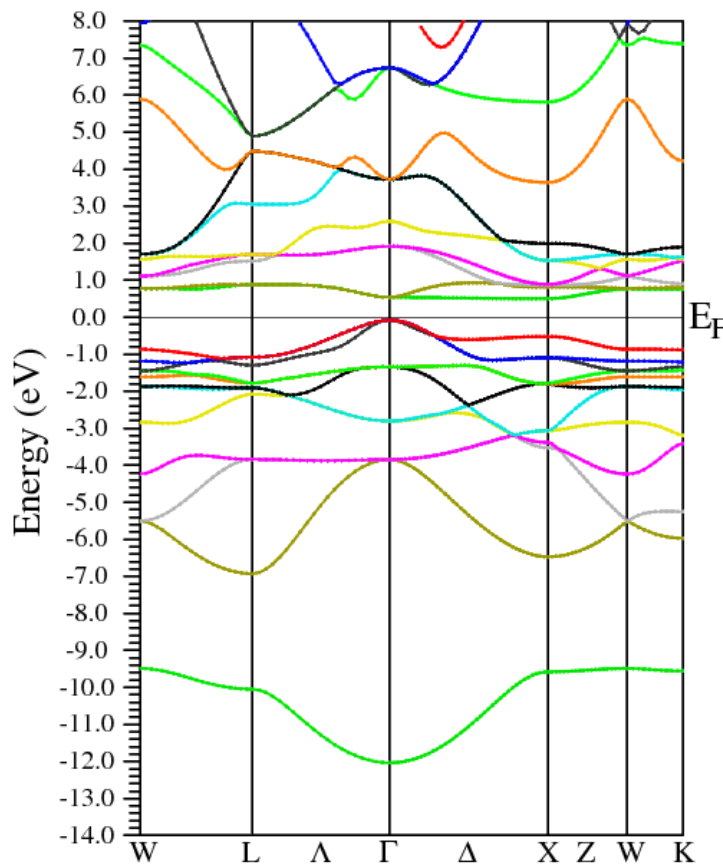


Figure II.14-b: La structure de bande du composé Co_2MnGe (spin-down)

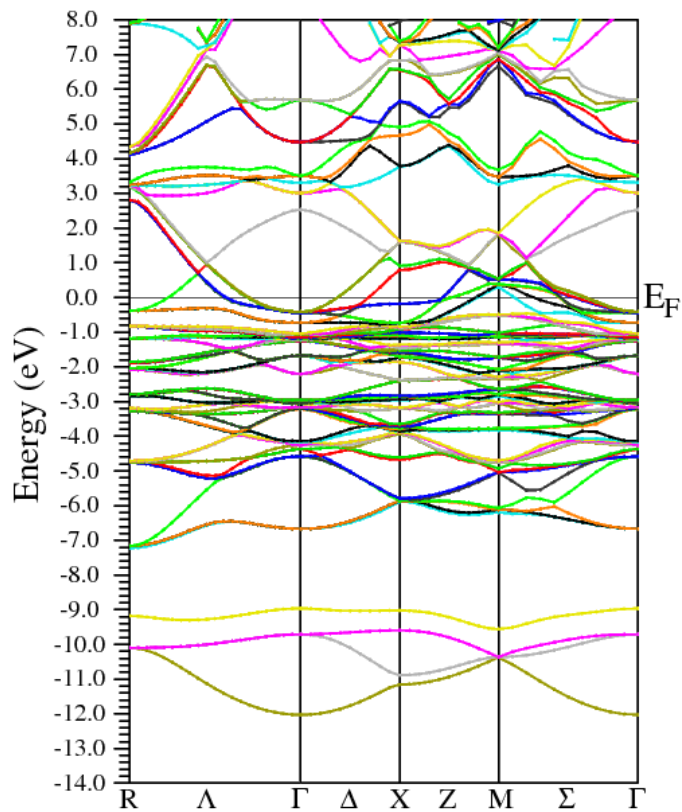


Figure II.15-a: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$ (spin-up)

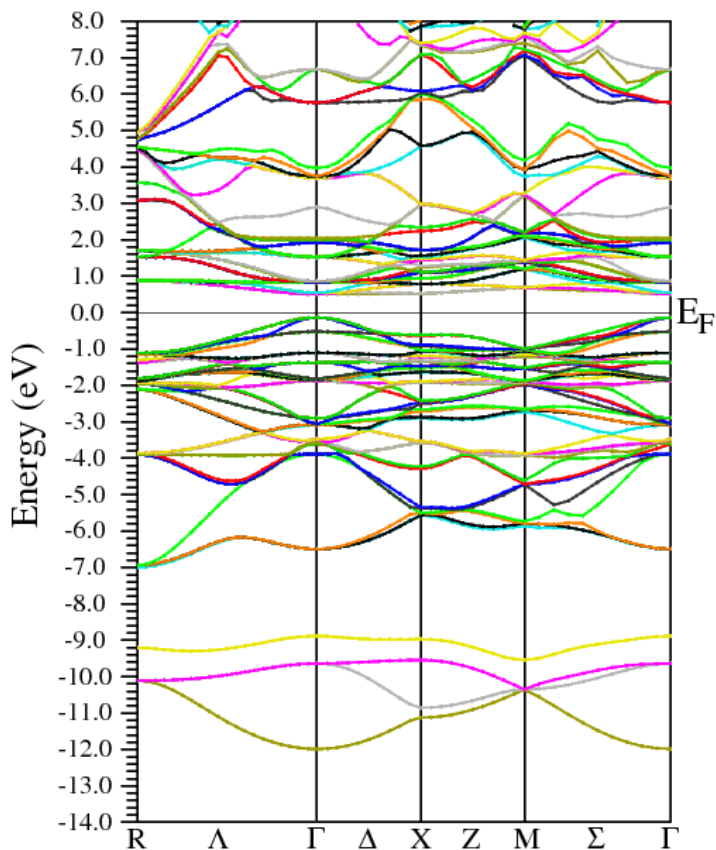


Figure II.15-b: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$ (spin-down)

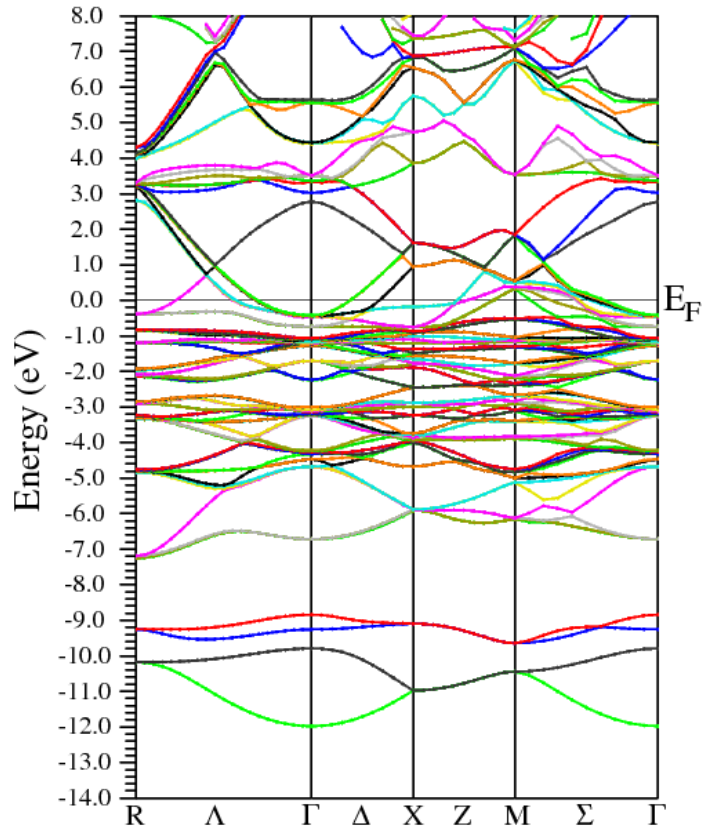


Figure II.16-a: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$ (spin-up)

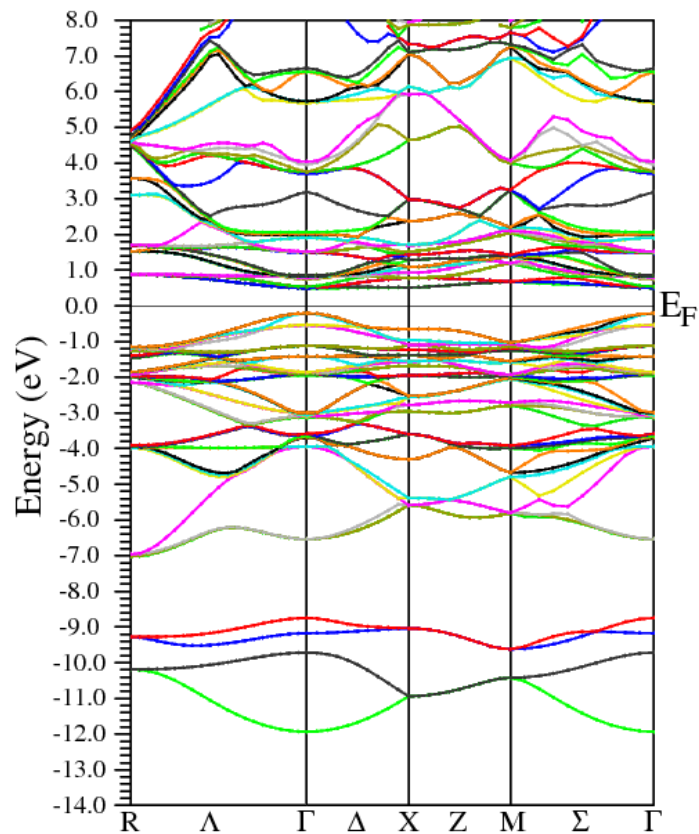


Figure II.16-b: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$ (spin-down)

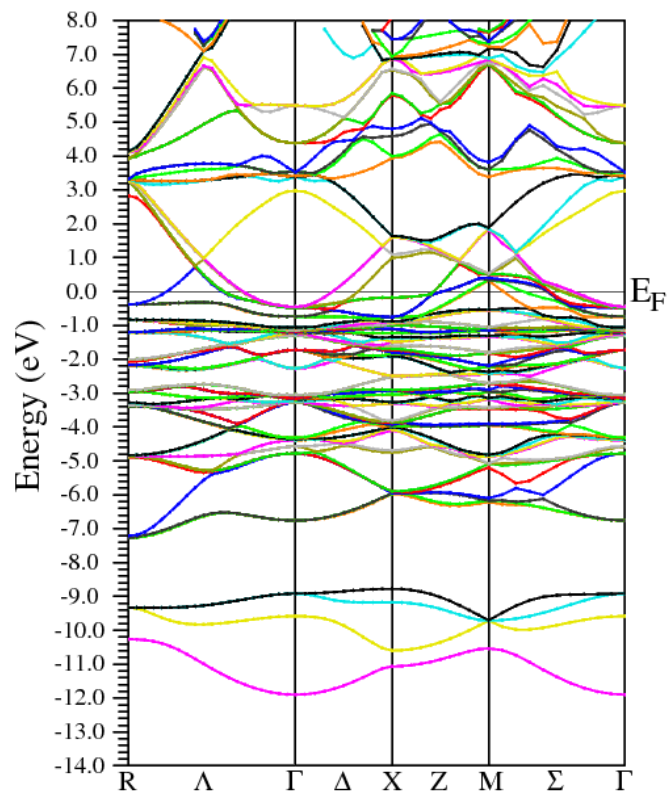


Figure II.17-a: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$ (spin-up)

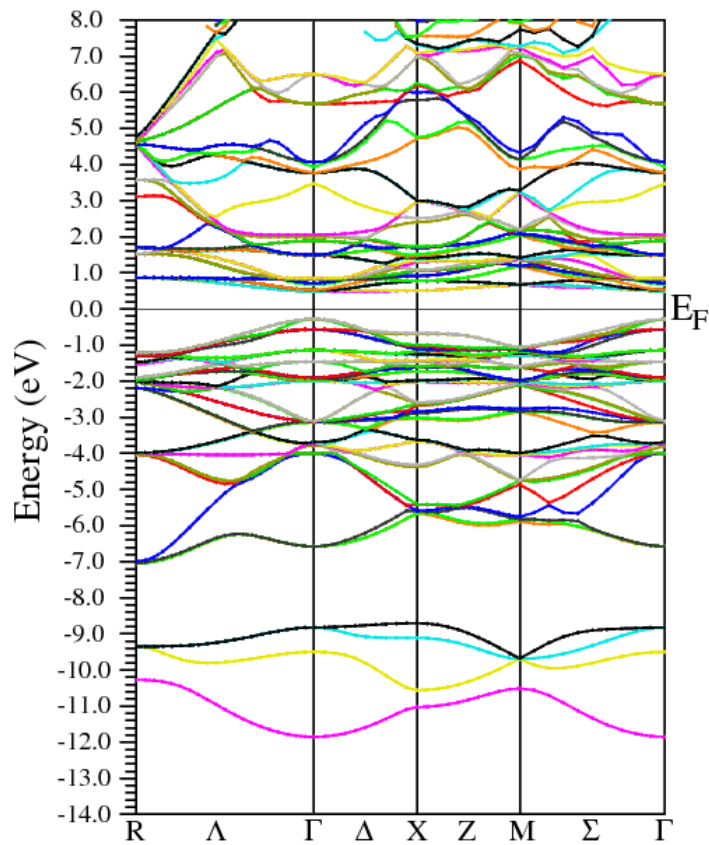


Figure II.17-b: La structure de bande du composé $\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$ (spin-down)

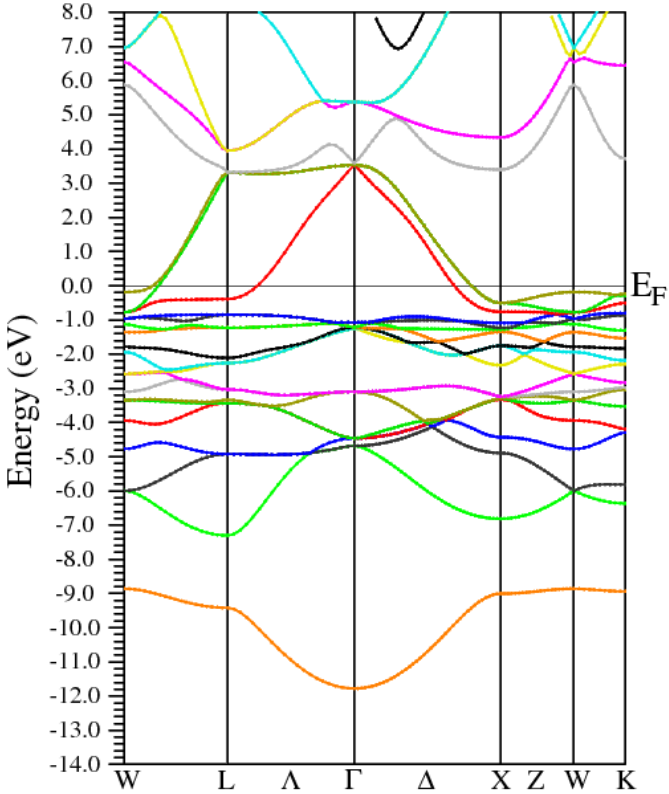


Figure II.18-a: La structure de bande du composé Co₂MnSi (spin-up)

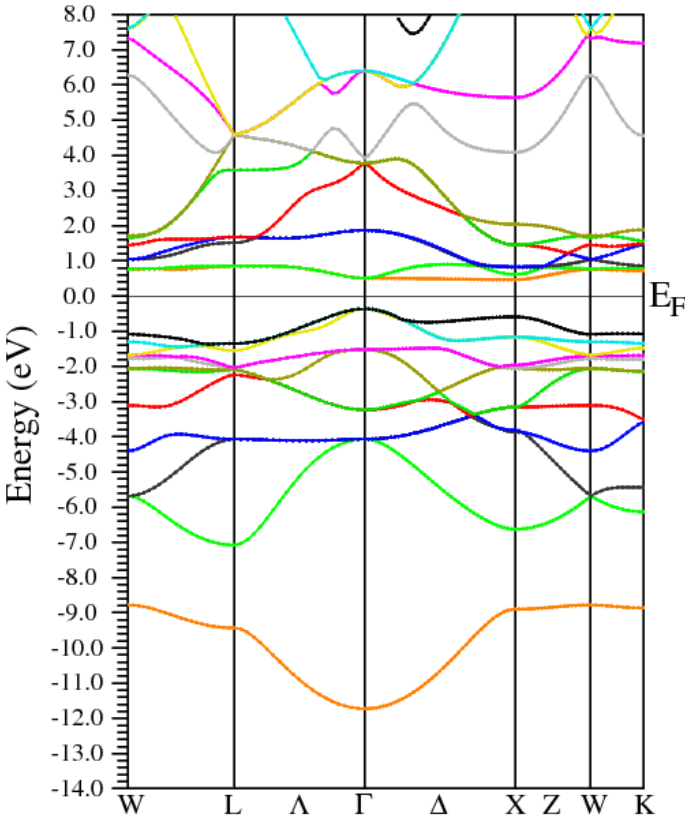


Figure II.18-b: La structure de bande du composé Co₂MnSi (spin-down)

Chapitre II :Résultat et discussion

Nous observons que toutes les structures de bandes de spins majoritaires (spin-up) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi, pour les cinq composés, ce qui indique un caractère métallique, tandis que les structures de spins minoritaires (spin-down) présentent un gap énergétique au niveau de Fermi, pour les cinq composés aussi, ce qui indique un caractère semi-conducteur de ces composés. Cette situation indique que nos matériaux parents, ainsi que leurs alliages sont des composés demi-métalliques.

Le tableau II.5 regroupe les valeurs de l'énergie de gap E_g (eV) calculées à partir des structures de bandes des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1). On remarque que les matériaux parents ont des gaps directs ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) tandis que leurs alliages ont des gaps indirects ($\Gamma \rightarrow X$).

$\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$		E_g (eV)	Type de gap
Co_2MnSi	Nos calculs (GGA-PBE)	0,82	$\Gamma \rightarrow X$
	Theo Ref.(GGA-PBE) [16]	0,81	$\Gamma \rightarrow X$
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$		0,64	$\Gamma \rightarrow \Gamma$
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$		0,70	$\Gamma \rightarrow \Gamma$
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$		0,76	$\Gamma \rightarrow \Gamma$
Co_2MnGe	Nos calculs (GGA-PBE)	0,58	$\Gamma \rightarrow X$
	Theo Ref.(GGA-PBE) [16]	0,54	$\Gamma \rightarrow X$

Tableau II.5: L'énergie de gap E_g (eV) des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

II.7. Propriétés magnétiques :

Dans le tableau au-dessous (Tableau II.6), nous présentons les résultats et valeurs obtenues pour le moment magnétique total et local en (μ_B) à l'équilibre pour les composés Co_2MnGe et Co_2MnSi et leurs alliages pour les concentrations x (0,25; 0,50 et 0,75) . En plus, nous citons aussi des résultats obtenus par d'autres :

$\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$	M_{Tot}	M_{Co}	M_{Mn}	M_{Ge}	M_{Si}	M_{Inter}
Co_2MnSi	5,000	1,067	2,936	/	-0,038	-0,032
	5,000 ^b	1,060 ^b	2,920 ^b	/	-0,040 ^b	/
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$	5,000	1,038	2,980	-0,040	-0,039	-0,065
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,50}\text{Si}_{0,50}$	5,000	1,048	2,960	-0,039	-0,040	-0,146
$\text{Co}_2\text{MnGe}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$	5,000	1,057	2,954	-0,039	-0,039	-0,116
Co_2MnGe	5,000	1,027	2,995	-0,041	/	-0,008
	5,000 ^b	1,020 ^b	2,980 ^b	-0,030 ^b	/	/

^a Ce travail. ^bRef. [16].

Tableau II. 6: Le moment magnétique total et local en (μ_B) des composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1)

On remarque que, pour les cinq composés, le moment magnétique est toujours un nombre entier ($5 \mu_B$), les valeurs obtenues satisfont à la règle de Slater-Pauling, ce qui confirme le caractère demi-métallique pour ces composés.

Nos résultats montrent aussi que le moment magnétique total de ces composés est dû principalement à l'atome de manganèse Mn.

D'après ces résultats, on peut classer nos composés $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ comme des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques.

II.8. Propriétés thermodynamiques :

D'après les lois de la dynamique, lorsqu'un réseau cristallin a une température supérieure au zéro absolu, son énergie n'est pas constante mais elle fluctue de manière aléatoire autour d'une valeur moyenne. Ces balancements d'énergie sont dus aux vibrations aléatoires du réseau, qui peuvent être vues comme un gaz de phonons (le mouvement aléatoire des atomes du réseau correspond à la chaleur). Comme ces phonons sont liés à la température du réseau, ils sont parfois nommés phonons thermiques, ces derniers sont des concepts de la mécanique quantique, leurs étude prend une part importante dans la physique de la matière condensée. Ils jouent un rôle important dans un grand nombre de propriétés des solides dont : la capacité calorifique ; la conductivité thermique, ou capacité à conduire la chaleur ; la conductivité électrique, ou capacité à conduire le courant ; la capacité à propager le son [23].

Le modèle quasi-harmonique de Debey permet de calculer :

- a) le module de compressibilité B ;
- b) le coefficient de dilatation thermique α ;
- c) le paramètre de Grüneisen γ ;
- d) la chaleur spécifique C_v , à volume constant ;
- e) la température de Debye θ_D qui est exprimée par :

Afin de décrire l'effet de la température des alliages d'Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) sur le caractère métallique, nous avons utilisé le code Gibbs2 [12]. Les propriétés thermodynamiques de ces alliages sont obtenues pour une gamme de température allant de 0K à 1200K.

Les figures II.19, II.20, II.21 et II.22 représentent la variation du paramètre de maille a (Å), module de compressibilité B (GPa), le coefficient de dilatation thermique α ($10^{-5} \cdot \text{K}^{-1}$) et la chaleur spécifique C_v ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

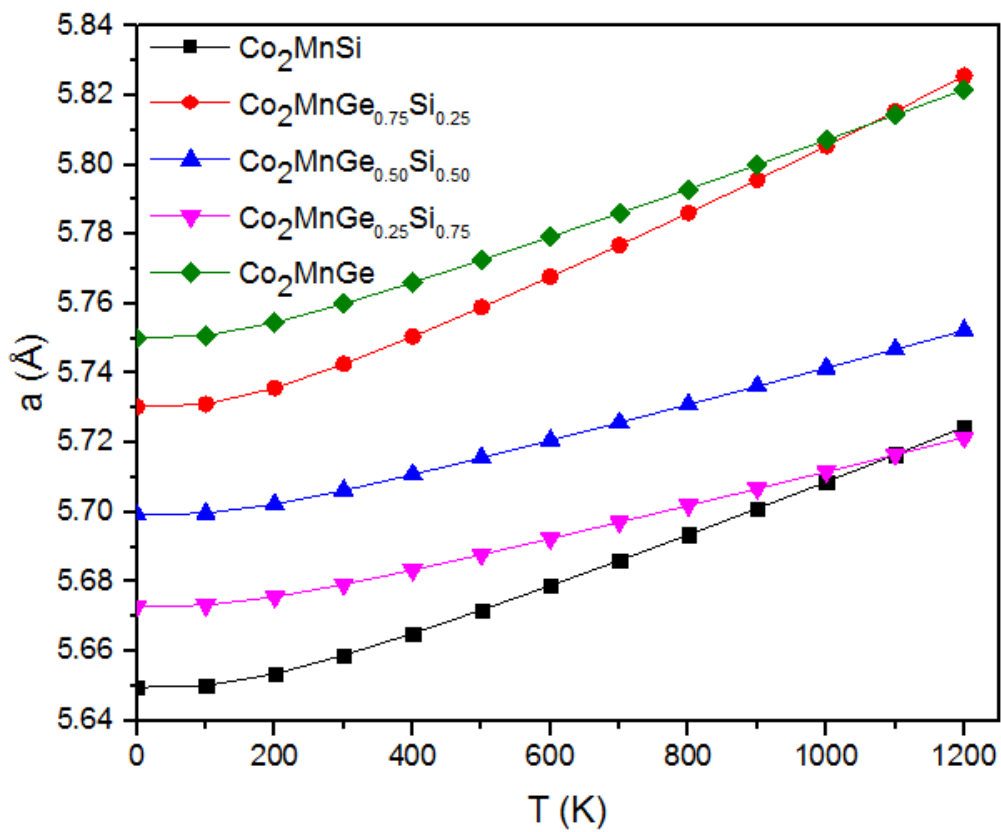


Figure. II.19: Variation du paramètre de maille a (Å) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

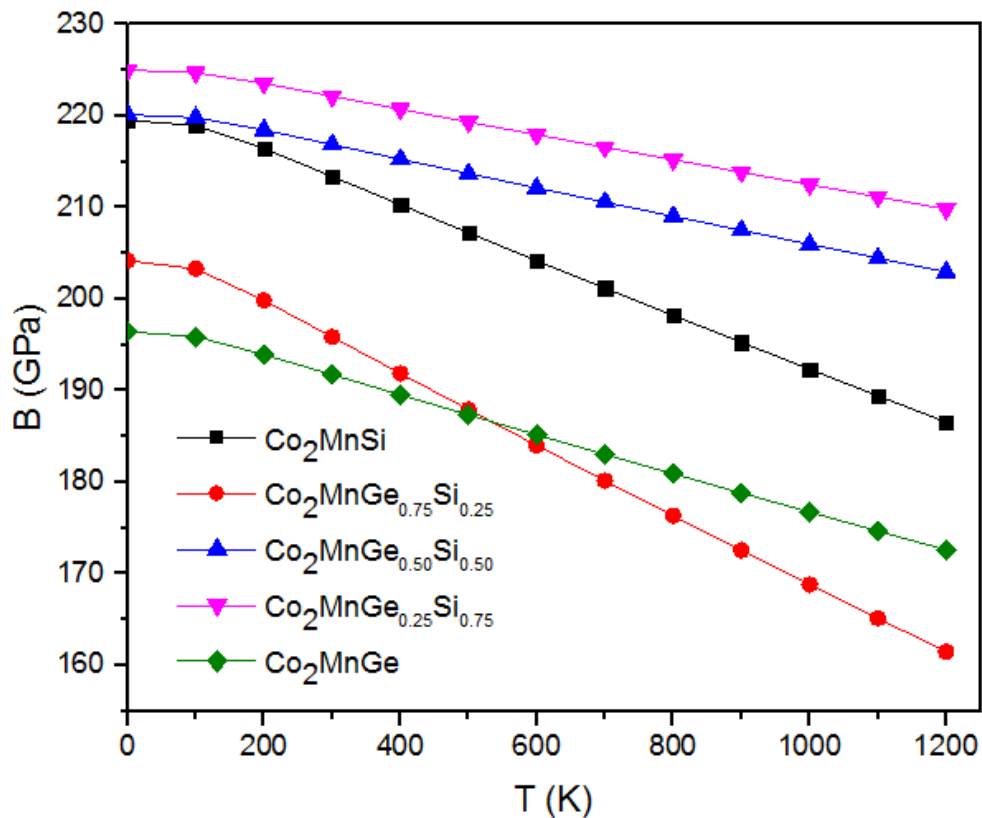


Figure. II.20: Variation du module de compressibilité B (GPa) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $\text{Co}_2\text{MnGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

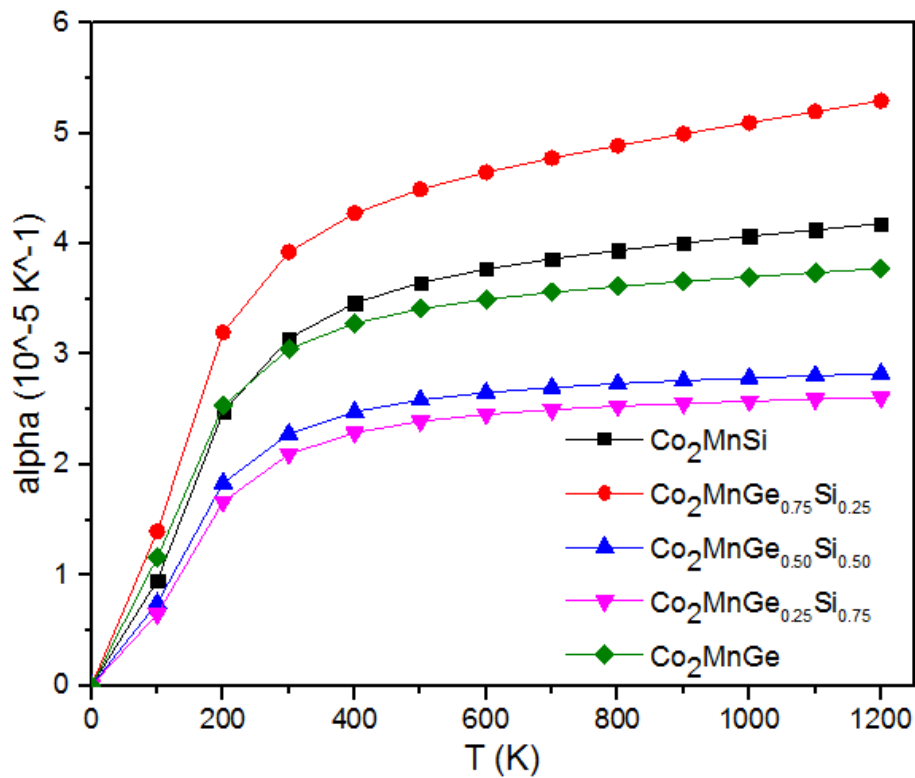


Figure. II.21: Variation du coefficient de dilatation thermique α ($10^{-5} \cdot K^{-1}$) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

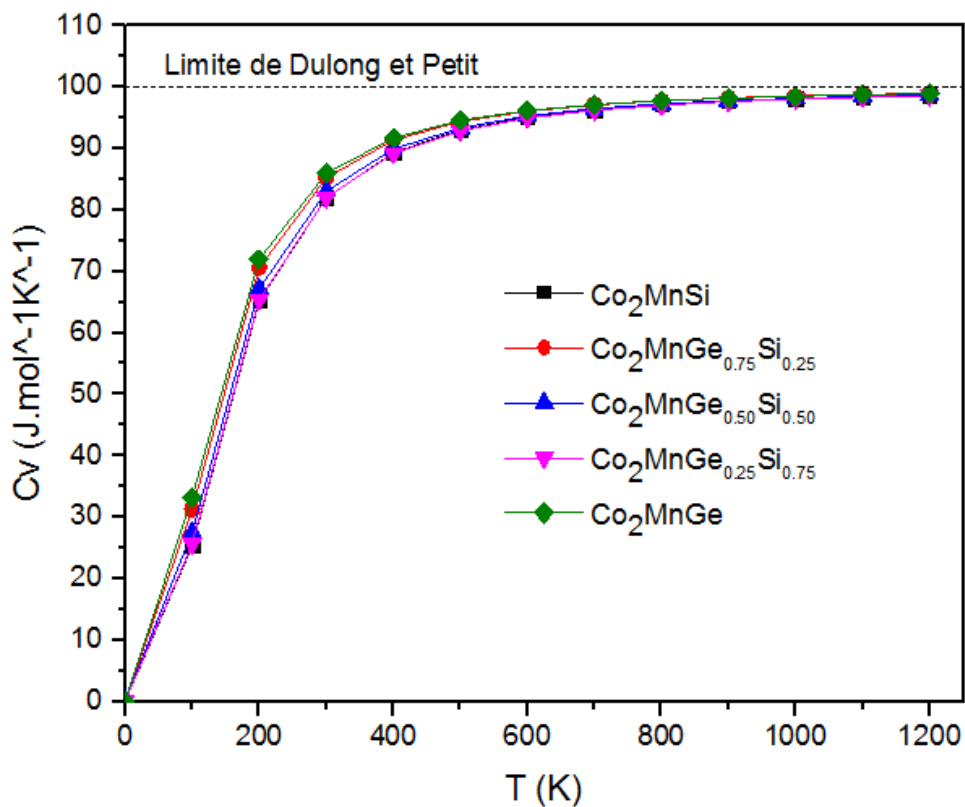


Figure. II.22: Variation de la chaleur spécifique C_v ($J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$) en fonction de la température T (K) pour les composés Heusler $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1).

Chapitre II :Résultat et discussion

On remarque que le paramètre de maille varie lentement pour des basses températures, puis il augmente rapidement d'une façon linéaire au-dessus de 200 K, et cela pour les composés parents ainsi que leurs alliages.

Le module de compressibilité quand à lui, il décroît en fonction de la température d'une manière presque linéaire pour les composés parents et même leurs alliages, alors que le coefficient de dilatation thermique augmente rapidement pour des basses températures puis se stabilise (croissance lente) pour les températures supérieures à 300 K pour toutes les concentrations.

La chaleur spécifique augmente rapidement en fonction de la température dans l'intervalle allant de 0 K jusqu'au près de 400 K, au dessus de cette valeur, la chaleur spécifique tend vers une limite égale à $100 \text{ J.mole}^{-1}.\text{K}^{-1}$, dite limite de "**Dulong-Petit**", cette limite dépend du nombre d'atomes ($N=4$) et de la constante $3R$ (R étant la constante des gaz parfaits, 8,31 SI), $C_V (\text{limite})=3 \times R \times N$.

I.9.Bibliographies:

- [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] H. ABBASSA, « *Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler* », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [8] User's guide, wien2k 12.1 Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz (release 30.08.2012).
- [9] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. K. vasnicka and J. Luitz, *WIEN2K*, **3**, 1 (2001)
- [10] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
- [11] D. M. Ceperley , B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [12] A. Otero-de-la Roza, D. Abbasi-Pérez, V. Luaña, *Computer Physics Communications* **182** (2011) 2232–2248.
- [13] E. Francisco, M.A. Blanco, G. Sanjurjo, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 094107.
- [14] Murnaghan FD. *Proc Natl Acad Sci U S A*; **30** (1947) 244.
- [15] P.J. Webster, *J. Phys. Chem. Solids* **32**, 1221 (1971).
- [16] S. Picozzi, A. Continenza and A. J. Freeman, *PHYSICAL REVIEW B* **66**, 094421 (2002)
- [17] H. Rached, D. Rached, R. Khenata, Ali H. Reshak, and M. Rabah. *Phys. Status Solidi B* **246**, No. 7 (2009) 1385–1393
- [18] Y. Le Page and P. Saxe, *Phys. Rev. B* **63**, (2001) 174103.
- [19] M. J. Mehl, J. E. Osburn, D. A. Papaconstantopoulos, and B. M. Klein, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 10311.

Chapitre II :Résultat et discussion

[20] M. J. Mehl, Phys. Rev. B **47** (1993) 2493.

[21] M. J. Mehl, B. M. Klein, and D. A. Papaconstantopoulos, in Intermetallic Compounds: Principles and Practice, Principles, edited by J. H. Westbrook and R. L. Fleischer, Vol.I. (1995).

[22] Wang, S. Yip, S. R. Phillpot, and D. Wolf, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 4182.

[23] D. BENTAIFOUR, « *Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire $NiCoMnGe_xSn_{1-x}$* », Université de Mostaganem, Mémoire de Master (2017).

Conclusion générale et perceptives

Conclusion générale et perspectives :

Ce modeste travail a été consacré pour étudier les propriétés physiques d'une classe d'alliages appelée les alliages Full Heusler, définie par la formule chimique X_2YZ . L'objectif de ce mémoire est de prédire les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques des matériaux $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ pour les concentrations $x = 0; 0,25; 0,50; 0,75$ et après avoir donné des définitions simples sur les matériaux magnétiques notamment les alliages Heusler .

Dans le cadre de la fonctionnalité de la densité (DFT), les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées avec un potentiel total (FP-LAPW) , et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation de la densité du gradient généralisée (GGA).

Les résultats obtenus à l'étude des propriétés structurales de ces alliages ont montré que le paramètre de réseau et le module de compressibilité pour les composés parents (Co_2MnGe et Co_2MnSi) sont généralement comparables avec des valeurs trouvées par d'autres travaux. Et pour leurs alliages, il n'existe pas d'autres travaux pour faire la comparaison.

À partir des calculs effectués sur nos matériaux, nous avons trouvé pour les deux composés Co_2MnGe et Co_2MnSi cristallisent dans la phase cubique $L2_1$. Nous avons aussi déduit que tous les composés $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ pour les concentrations $x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1 sont des matériaux magnétiques demi-métalliques.

Les propriétés électroniques montrent que les composés $Co_2MnGe_{1-x}Si_x$ ($x=0; 0,25; 0,50; 0,75$ et 1) présentent un caractère métallique pour les spin majoritaires (spin-up) et un caractère semi-conducteur pour les spin minoritaires (spin-down).

L'exploitation des résultats fournis par l'étude des propriétés magnétiques établit que l'origine du magnétisme dans nos alliages d'Heusler provient principalement du métal de transition Mn.

Les propriétés thermodynamiques ont été étudiées en se basant sur le modèle quasi-harmonique de Debye implémenté dans le programme Gibbs2. L'analyse du paramètre de maille a , module de compressibilité B , coefficient de dilatation thermique α et de la capacité calorifique C_v en fonction de la température est faite dans le but d'enrichir d'autres travaux éventuels.

Au niveau des perspectives de notre étude, elles seront tributaires des méthodes de calcul choisies et dépendront aussi des orientations. À ce propos, il pourrait être intéressant de poursuivre des investigations sur les points suivants :

- Utiliser d'autres approximations comme la *LDA*, *EVGGA*, afin d'améliorer certains de nos résultats.
- Etudier la stabilité structurale à travers le calcul des phonons.