



وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



جامعة عبد الحميد بن باديس - مستغانم  
Université Abdel Hamid Ben Badis – Mostaganem  
كلية العلوم والتكنولوجيا  
Faculté des Sciences et de la Technologie  
**DEPARTEMENT DE GENIE DES PROCÉDES**

N° d'ordre : M2...../GPM/2022

## MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Génie des procédés  
Option: Génie des procédés des matériaux

### Thème

*Etude Ab-initio des propriétés thermodynamiques  
et thermoélectriques du composé demi-Heusler FeVSn*

Présenté par:

1. Mana Soheyb
2. Aid Mounir

Soutenu le 16/06/ 2022 devant le jury composé de:

Présidente :	Sefir Yamina	Grade	MCA	U - Mostaganem
Examinatrice:	Mehtougui Nabila	Grade	MCB	U - Mostaganem
Encadrante :	Terkhi Sabria	Grade	MCA	U - Mostaganem

Année Universitaire : 2021 / 2022

# Remerciements

---

*Ce mémoire de Master a été réalisé au laboratoire « Technologie et propriétés des solides » (TPS), Département de Génie des procédés, Faculté des Sciences et de la Technologie, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.*

*Nous exprimons toute notre gratitude et notre profonde reconnaissance à notre encadrante Madame **Terkhi Sabria**, Maître de conférences à l'université de Mostaganem. Nous sommes particulièrement honorées par la présence de madame **Sefir Yamina**, Maître de conférences à l'université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem qui a bien accepté de présider ce jury de mémoire. Nos vifs remerciements s'adressent à madame **Mehtougui Nabila**, Maître de conférences à l'université de Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem pour avoir bien voulu faire partis du jury et d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

## ***Dédicaces***

---



*Louange à Allah le tout puissant, qui m'a donné la volonté, la force, et qui m'a éclairé le bon chemin, que nul ne peut se faire sans son désir.*

*Je dédie ce travail :*

- *A mon très cher Père*
- *A ma très cher Mère*
- *A mes deux frères Bilal et Omar ainsi ma seule sœur Meriem Assinet*
- *A mes défunts grand pères Hadj Saïd et Hadj Mohamed*
- *A mon défunt oncle Hadj Slimane*
- *A toute ma famille maternelle et paternelle.*

*Soheyb*

## *Dédicaces*

---



*On ne se construit pas seul mais au travers de nos différentes expériences et les personnes chères qui nous ont permis d'en arriver là à qui je dédie ce travail :*

*A mes très chers parents qui ont tout sacrifié en ma faveur, c'est eux qui m'ont aidé dans ma vie. Je l'es porterais toujours dans mon coeur.*

*À mon Frère*

*À ma Famille*

*À mes Amis*

*Mounir*

## Résumé

Dans le présent travail, les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, thermodynamiques et thermoélectriques du composé demi Heusler FeVSn ont été étudiées en utilisant la méthode des ondes planes augmentés et linéarisées (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k. L'approximation de gradient généralisé de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) et la méthode du potentiel d'échange de Becke-Johnson modifiée par Tran-Blaha (TB-mBJ) ont été utilisées pour modéliser le potentiel de corrélation d'échange. Les résultats obtenus montrent que le composé FeVSn présente un comportement ferromagnétique demi-métallique par l'approximation TB-mBJ avec une polarisation absolue de 100% autour du niveau de Fermi dans le canal majoritaire. Le moment magnétique totale de composé étudié est entier obéisse à la règle de Slater- Pauling. Les propriétés thermodynamiques y compris le volume, le module de compressibilité, la capacité thermique, la température de Debye, l'entropie et le coefficient de dilatation thermique sont étudiés en utilisant le modèle quasi-harmonique de Debye. Les résultats thermodynamique montrent la stabilité du FeVSn sous l'action des pressions et des températures très élevés. Les propriétés thermoélectriques sont déterminées par le cod Boltz-Trap. Les valeurs du facteur de mérite (ZT) sont proches de l'unité de 0.995 et de 0.851 à 50K et à 800 K, respectivement, indiquent que notre composé est potentiellement de bon candidat pour les applications thermoélectriques.

**Mots clés:** Demi Heusler, DFT, Demi-metallicité, Ferromagnétique, Propriétés thermodynamiques et thermoélectriques.

## **Abstract**

In the present work, the structural, electronic, magnetic, thermodynamic and thermoelectric properties of the half Heusler compound FeVSn were studied using the augmented and linearized plane wave method (FPLAPW) based on the density functional theory (DFT) implemented in the WIEN2k code. The Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (GGA-PBE) and Tran-Blaha modified Becke-Johnson exchange potential method (TB-mBJ) were used to model the correlation potential of exchange. The results obtained show that the FeVSn compound exhibits semi-metallic ferromagnetic behavior; its magnetic moment obeys the Slater-Pauling rule with an absolute polarization of 100% around the Fermi level. Thermodynamic properties including modulus of compressibility, heat capacity, Debye temperature, entropy and coefficient of thermal expansion are investigated using the Debye quasi-harmonic model. The thermodynamic results show the stability of FeVSn under the action of very high pressures and temperatures. The merit factor ( $ZT$ ) values are close to unity of 0.995 and 0.851 at 50K and 800 K, respectively, indicating that our compound is potentially a good candidate for thermoelectric applications.

**Keywords:** Half Heusler, DFT, Half-metallicity, Ferromagnetics, Thermodynamic and thermoelectric properties.

## ملخص

في العمل الحالي، تمت دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية والديناميكية الحرارية والكهروحرارية لمركب Heusler النصف FeVSn باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة والخطية (FPLAPW) بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). تم استخدام تقريب التدرج المعمم (GGA-PBE) Perdew-Burke-Ernzerhof وطريقة احتمال التبادل Becke-Johnson المعدلة من (TB-mBJ) لنمذجة إمكانات الارتباط للتبادل. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن مركب FeVSn يظهر سلوكًا مغناطيسيًا مغناطيسيًا شبه معدني. تخضع عزمها المغناطيسي لقاعدة Slater-Pauling باستقطاب مطلق بنسبة 100٪ حول مستوى Fermi. تمت دراسة الخصائص الديناميكية الحرارية بما في ذلك معامل الانضغاط والسعة الحرارية ودرجة حرارة ديبي والنتروبييا ومعامل التمدد الحراري باستخدام نموذج ديبي شبه التوافقي. تظهر النتائج الديناميكية الحرارية استقرار FeVSn تحت تأثير درجات الحرارة والضغط العالية جدًا. تقترب قيم عامل الاستحقاق (ZT) من الوحدة البالغة 0.995 و0.851 عند 50 كلفن و800 كلفن، على التوالي، مما يشير إلى أن مركبنا من المحتمل أن يكون مرشحًا جيدًا للتطبيقات الكهروحرارية.

**الكلمات المفتاحية:** نصف Heusler، DFT، نصف المعدنية، المغناطيسية الحديدية، الخصائص

الحرارية والديناميكية الحرارية.

## *Sommaire*

<b>Remerciements .....</b>	<b>i</b>
<b>Dédicaces .....</b>	<b>ii</b>
<b>Résumé.....</b>	<b>iii</b>
<b>Sommaire.....</b>	<b>iv</b>
<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
<b>Bibliographie .....</b>	<b>3</b>

### *Chapitre I*

#### *Thermoélectricité, Spintronique et matériaux Heusler*

<b>I.1 Introduction.....</b>	<b>5</b>
<b>I.2 Thermoélectricité.....</b>	<b>5</b>
<b>I.2.1 Historique de la thermoélectricité.....</b>	<b>5</b>
<b>I.2.2 Facteur de mérite.....</b>	<b>7</b>
<b>I.2.3 Applications de la thermoélectricité .....</b>	<b>7</b>
<b>I.2.4 Avantages de l'utilisation des générateurs thermoélectriques .....</b>	<b>9</b>
<b>I.3 Spintronique.....</b>	<b>10</b>
<b>I.3.1 Phénomènes de Spintronique.....</b>	<b>10</b>
<b>I.3.1.1 Magnéto-résistance géante (MRG) .....</b>	<b>10</b>
<b>I.3.1.2 Magnéto-résistance tunnel (MRT) .....</b>	<b>11</b>
<b>I.4 Alliages Heusler .....</b>	<b>11</b>
<b>I.4.1 Formule chimique des alliages Heusler .....</b>	<b>11</b>
<b>I.5 Demi-métallicité des alliages Heusler.....</b>	<b>13</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>14</b>

## Chapitre II

### Méthodes de calcul

II.1 Introduction .....	16
II.2 Equation de Schrödinger .....	16
II.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer .....	17
II.2.2 Approximation de Hartree et de Hartree-Fock.....	17
II.2.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	18
II.2.3.1 Modèle de Thomas-Fermi.....	18
II.2.3.2 Equations de Kohn-Sham.....	18
II.2.4 Energie d'échange et corrélation .....	19
II.2.4.1 Approximation du gradient généralisé (GGA).....	20
II.2.4.2 Approximation du potentiel modifié (MBJ) .....	20
II.3 Code Wien2k.....	21
II.4 Méthodologie de calcul .....	22
II.5 Conclusion.....	22
Bibliographie.....	23

## Chapitre III

### Résultats et discussions

III.1 Introduction .....	26
III.2 Propriétés structurales .....	26
III.3 Propriétés électroniques.....	28
III.3.1 Structure de bandes.....	28
III.4 Propriétés magnétiques .....	30
III.5 Propriétés thermodynamiques .....	30
III.5.1 Module de compressibilité (B).....	31

<b>III.5.2 Volume (V) .....</b>	<b>32</b>
<b>III.5.3 Capacité thermique à volume constant (<math>C_V</math>) .....</b>	<b>32</b>
<b>III.5.4 Température de Debye (<math>\theta_D</math>) .....</b>	<b>33</b>
<b>III.5.5 Entropie (S) .....</b>	<b>34</b>
<b>III.5.6 Coefficient de dilatation thermique (<math>\alpha</math>).....</b>	<b>35</b>
<b>III.6 Propriétés thermoélectriques.....</b>	<b>36</b>
<b>III.6.1 Conductivité électrique (<math>\sigma/\tau</math>).....</b>	<b>36</b>
<b>III.6.2 Coefficient de Seebeck (S) .....</b>	<b>37</b>
<b>III.6.3 Conductivité thermique (<math>K/\tau</math>).....</b>	<b>38</b>
<b>III.6.4 Facteur de mérite (ZT).....</b>	<b>39</b>
<b>III.7 Conclusion .....</b>	<b>40</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>41</b>
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>42</b>

## **Introduction Générale**

Au regard du réchauffement climatique et de l'utilisation des matières fossiles qui ne cesse d'augmenter, il est nécessaire de développer de nouvelles sources d'énergie renouvelables permettant de suppléer à une partie de ces énergies fossiles [1].

Au cours de ces dernières années, en raison de la demande croissante en énergie, de son coût, de l'importance de son utilisation, de nombreux travaux de recherche ont étudié et proposé la récupération d'énergie comme une alternative aux modes de production d'énergie standard [2]. Par ailleurs, ces recherches répondent également à l'importance croissante accordée aux préoccupations environnementales [3]. Ces technologies de récupération d'énergie ambiante par des matériaux thermoélectriques sont apparues comme une solution prometteuse pour satisfaire les exigences d'alimentation d'une grande variété de dispositifs à base des matériaux solides.

La compréhension des propriétés physique d'un matériau nécessite la connaissance fondamentale de sa structure, sa stabilité de phases et de ces diverses propriétés structurales, électroniques, magnétiques, thermodynamiques, thermoélectriques.....etc. Le progrès rapide du monde est liée à l'utilisation correcte des matériaux dans les différentes filières de vie, donc il est nécessaire de crée un champ spécialisé à l'étude par la caractérisation et la modélisation de ses matériaux, c'est la science des matériaux. Elle repose sur la relation entre les propriétés, la morphologie structurale et la mise en œuvre des matériaux qui constituent les objets qui nous entourent (métaux, semi-conducteurs, céramiques, composites, etc.). La connaissance et la maîtrise des phénomènes microscopiques confèrent aux scientifiques et aux industriels la possibilité d'élaborer de nouveaux matériaux aux propriétés et aux performances voulues pour différentes applications.

Actuellement, la nouvelle technologie cherche sa matière première dans le tableau périodique des éléments, en se basant sur la loi naturelle qui affirme que la combinaison de deux matériaux différents ne présente pas une combinaison de leurs propriétés mais donne plutôt naissance à des caractéristiques nouvelles propres à l'alliage. A ce titre, les composés Heusler ont suscité un intérêt considérable à la fois théorique et expérimental en raison de

leurs propriétés physiques ambitieuses qui leur permettent de les utiliser pour des applications de spintroniques [4] et thermoélectriques [5, 6]. Les demi-Heusler de formule chimique XYZ, où X et Y sont des métaux de transition et Z désigne un élément de la colonne III-Vde tableau périodique, cristallisent dans la structure MgAgAs avec le groupe d'espace F43m [7]. L'utilisation des matériaux semi-métalliques dans des dispositifs de spintronique, ou l'électronique de spin qui est toujours un sujet d'actualité et d'innovation permanente. Son potentiel industriel est important tels que les têtes de lecture de disques durs, les mémoires magnétiques non volatiles à accès aléatoire (MRAM) et les capteurs magnétiques.

Au cours de ces dernières années, des nouveaux domaines d'applications émergés, comprenant des technologies environnementales comme la thermoélectricité [8, 9] et la technologie des cellules solaires [10], même la découverte récente des isolants topologiques qui présente un nouveau quantum d'état de la matière ; tous ces intéressantes propriétés ouvrent une grande porte aux technologies du futur avec des possibilités inimaginables pour l'utilisation les composés Heusler [11, 12].

Dans ce contexte, notre travail présente une étude Ab-initio des propriétés structurales, électromagnétiques, et pour la première fois les propriétés thermodynamiques et thermoélectrique du composé demi-Heusler FeVSn.

Après une introduction générale, ce mémoire est organisé de la manière suivante :

- Le premier chapitre, illustre l'explication détaillée de la thermoélectricité et ces effets thermoélectriques, nous rappelons par la suite certaines notions liées au magnétisme. Nous présentons des généralités sur les alliages Heusler et leurs propriétés et certaines applications liées aux composés Heusler ferromagnétiques dans la technologie.
- Le deuxième chapitre cible le cadre théorique dans lequel a été effectué ce travail. Les fondements de la DFT sont exposés, et l'accent est porté sur la partie échange et corrélation de l'énergie, qui conditionne de façon cruciale la qualité des résultats obtenus. On a abordé le principe de la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW), avec une brève description du code Wien2k.
- Le dernier chapitre présente les résultats obtenus de l'étude des différentes propriétés du demi Heusler FeVSn.

Enfin, ce travail s'achève par une conclusion générale, résumant les principaux résultats obtenus avec les interprétations physiques associées

## **Bibliographie**

- [1] Y.Xing, et al. Energy & Environmental Science 12.11, 3390-3399 (2019).
- [2] J.Yu, et al. Journal of Physics D: Applied Physics 51.11, 113001(2018).
- [3] D.Kieven, R.Klenk, S.Naghavi, C.Felser and T.Gruhn, Phys. Rev, B81, pp. 075208(1-6) (2010).
- [4] I.Galanakis, P.Mavropoulos, P.H.Dederichs, J.Phys. D.Appl. Phys. 39: 765 (2006).
- [5] V.A.Dinh, K.Sato, H.K.Yoshida, J Supercond Nov Magn 23: 75 (2010).
- [6] Lihong Huang, et al, Recent progress in half-Heusler thermoelectric materials, Materials Research Bulletin, 76 : 107-112 (2016).
- [7] C.T.Tanaka, J.Nowak and J.S.Moodera, J.Appl. Phys. 81, 8 (1997).
- [8] Y.Xing, et al. Energy & Environmental Science 12.11, 3390-3399 (2019).
- [9] J.Yu, et al. Journal of Physics D: Applied Physics 51.11, 113001(2018).
- [10] D.Kieven, R.Klenk, S.Naghavi, C.Felser and T.Gruhn, Phys. Rev, B81, pp. 075208(1- 6) (2010).
- [11] H.Zhao, et al. Advanced Energy Materials 7.18, 1700446 (2017).
- [12] M.Zeeshan, et al. Physical Review Materials 1.7, 075407 (2017).

***Chapitre I***  
***Thermoélectricité, Spintronique***  
***et matériaux Heusler***

---

## I.1 Introduction

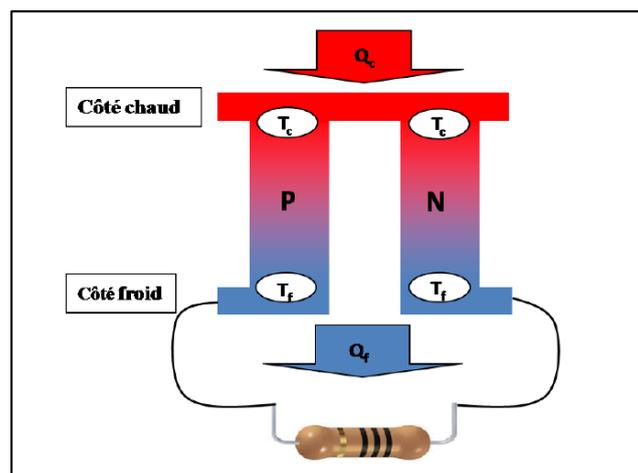
L'objectif de ce chapitre est d'introduire le contexte dans lequel le mémoire s'inscrit. Tout d'abord, une généralité sur la thermoélectricité est détaillée. Ensuite, des définitions ainsi des applications qui utilisent des phénomènes du domaine spintronique sont donnés. Finalement, les principales caractéristiques des alliages Heusler sont présentées.

## I.2 Thermoélectricité

L'effet thermoélectrique est un phénomène physique caractéristique de certains matériaux contribuant à la conversion de l'énergie. Un matériau thermoélectrique permet de transformer directement de la chaleur en électricité (génération d'électricité) ou de déplacer des calories par l'application d'un courant électrique (application de réfrigération); Ainsi l'énergie thermique peut être transformée en énergie électrique et réciproquement.

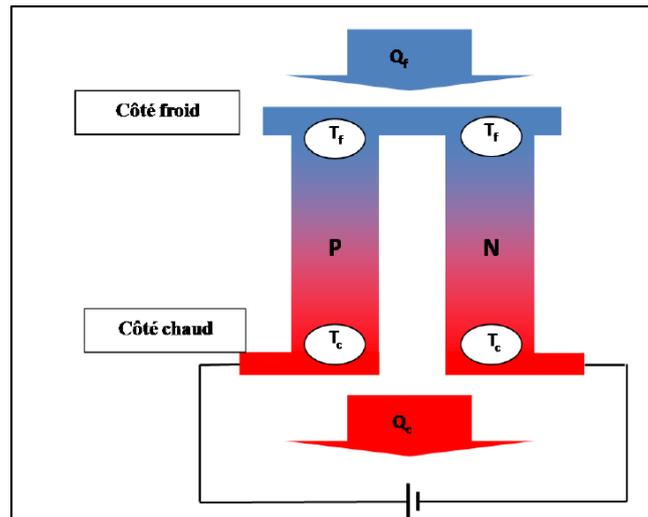
### I.2.1 Historique de la thermoélectricité

- **1821** Le premier effet thermoélectrique a été découvert par Thomas Johan Seebeck [1], il a mis en évidence qu'un circuit fermé formé de deux matériaux de nature différente faisait dévier l'aiguille d'une boussole quand l'une des jonctions est placée à une température différente (Figure I.1).



**Figure I.1:** Schéma illustrant l'effet Seebeck.

- **1834** Jean Charles Athanase Peltier a découvert un autre effet thermoélectrique [2], la Réfrigération. L'effet Peltier est un phénomène physique de déplacement de la chaleur en présence d'un courant électrique (Figure I.2).



**Figure I.2 :** Schéma descriptif de l'effet Peltier.

- **1851** William Thomson a publié une explication complète des effets Seebeck et Peltier et a décrit leur corrélation [3]. Contrairement aux effets Seebeck et Peltier, l'effet Thomson ne nécessite pas la présence d'une jonction de deux matériaux, c'est un effet qui est observable pour un seul matériau.
- **1910** Edmund Altenkirch a suggéré le concept du facteur de mérite. Il a montré que les bons matériaux thermoélectriques devaient posséder un fort coefficient Seebeck, une conductivité électrique élevée et une faible conductivité thermique.
- **1949** Abram Ioffe a proposé que les matériaux semi-conducteurs dopés soient les meilleurs candidats pour être des matériaux thermoélectriques, la conductivité thermique de réseau pouvant être réduite de manière significative sans la détérioration des autres paramètres thermoélectriques.
- **1954** Julien Goldsmid a été le premier à identifier le Tellure de Bismuth comme matériau pour la réfrigération thermoélectrique et a montré que des refroidisseurs thermoélectriques pouvaient atteindre zéro degré Celsius.
- **1995** Glenn Slack a introduit de nouveaux critères de sélection d'un bon matériau thermoélectrique et a développé la notion de « Phonon Glass Electron Crystal ». Ce matériau devait posséder les propriétés électriques d'un cristal et les propriétés thermiques d'un verre.

### I.2.2 Facteur de mérite

Les qualités d'un matériau thermoélectrique se mesurent par un nombre sans dimension, appelé facteur de mérite  $ZT$  donné par la relation [4]:

$$ZT = TS^2 \frac{\sigma}{K} \quad (I.1)$$

Avec  $T$  la température absolue (en Kelvin),  $S$  le pouvoir thermoélectrique (ou coefficient de Seebeck),  $\sigma$  la conductivité électrique et  $K$  la conductivité thermique.

D'un point de vue qualitatif, on comprend aisément qu'un bon matériau thermoélectrique doit posséder un bon coefficient Peltier ou Seebeck pour générer les effets attendus. Sa résistivité électrique  $\rho$  doit être faible pour minimiser les pertes de chaleur par effet joule, et il doit présenter une faible conductivité thermique  $k$  pour maintenir une différence de température appréciable aux bornes du matériau.

### I.2.3 Applications de la thermoélectricité

Les générateurs thermoélectriques (GTEs) fonctionnant avec l'effet Seebeck ont été utilisés pour la génération d'électricité à partir des sources de chaleurs omniprésentes dans de nombreux secteurs d'activités industrielles tel que :

- ❖ La montre Thermique est considérée comme l'une des premières applications utilisant des générateurs thermoélectriques [5] (Figure I.3).



**Figure.I.3** : Schéma illustrant une montre Thermique.

- ❖ Dans le domaine de l'automobile, Les générateurs thermoélectriques peuvent être utilisés pour récupérer les chaleurs rejetées et les transformer en une puissance électrique pour alimenter des dispositifs électriques du véhicule. Cette puissance récupérée pourrait également recharger les batteries à la place de l'alternateur (Figure I.4).



**Figure.I.4 :** Conception d'un générateur thermoélectrique produisant de l'électricité de la chaleur perdue au niveau du pot d'échappement d'un véhicule.

- ❖ Les générateurs thermoélectriques à radio-isotope RTG (Radio-isotope Thermoelectric Generator) utilisés par de nombreuses sondes spatiales de NASA sont un exemple très connu dans le domaine de la génération thermoélectrique [6]. Ces générateurs peuvent convertir la chaleur produite par des sources radioactives en une puissance électrique (Figure I.5).
- ❖ Ils sont également utilisés dans les dispositifs portatifs, par exemple dans le secteur médical pour entretenir le refroidissement des enceintes servant au transport des organes, des glacières commerciales (Figure I.6), etc...



Figure I.5 : Sonde spatiale Pioneer à radio-isotope



Figure I.6 : Refroidissement à base de modules thermoélectriques : glacières.

#### I.2.4 Avantages de l'utilisation des générateurs thermoélectriques

Les avantages de l'utilisation des générateurs thermoélectriques dans toutes les applications citées dessus sont :

- Absence d'émission de gaz à effet de serre
- Systèmes silencieux (absence de nuisances sonores et de vibrations)
- Grande fiabilité
- L'autonomie

- La longévité des matériaux
- Faible maintenance

### I.3 Spintronique

La spintronique ou l'électronique de spin est née en 1988, année de la découverte de la Magnéto Résistance Géante par les équipes d'Albert Ferten France et de Peter Grunbergen Allemagne [7]. Cette découverte qui leur a valu le prix Nobel en 2007. Ce domaine de la physique exploite non seulement la charge mais aussi le degré de liberté de spin de l'électron pour stocker et coder l'information. Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott en 1936, a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 70 [8, 9].

#### I.3.1 Phénomènes de Spintronique

##### I.3.1.1 Magnéto-résistance géante (MRG)

Il s'agit également d'un effet quantique observé dans les structures de films minces composées d'une alternance de couches ferromagnétiques Fe et de couches non magnétiques Cr (Figure I.7). La magnéto résistance géante est aussi observée dans des composés granulaires, par exemple dans la matrice de cuivre contenant des granules de cobalt. Cependant, les effets ne sont pas aussi importants que ceux présentés par les multicouches et les champs de retournement des aimantations sont également plus élevés.

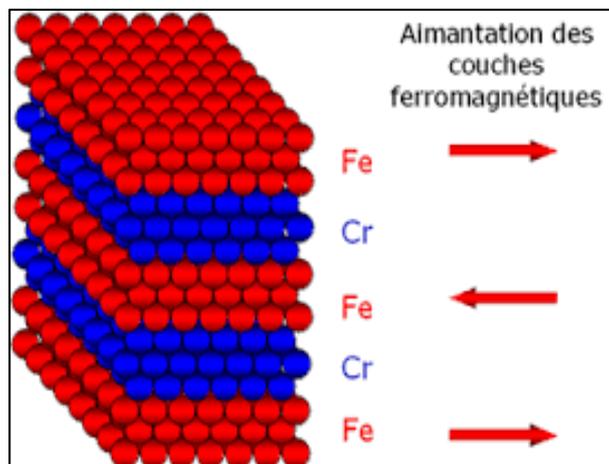


Figure I.7 : Schéma descriptif de la Magnéto-résistance géante.

### I.3.1.2 Magnéto-résistance tunnel (MRT)

Cet effet qui est similaire à la magnétorésistance géante a été observé dans des systèmes constitués de deux électrodes ferromagnétiques (couche libre et couche piégée) séparées par une fine couche isolante (appelée barrière tunnel) dont l'épaisseur est de l'ordre du nanomètre. La couche isolante ou semi conductrice, très fine, est une barrière qui autorise le transport électronique par effet tunnel, on obtient alors une jonction tunnel magnétique (Figure I.8).

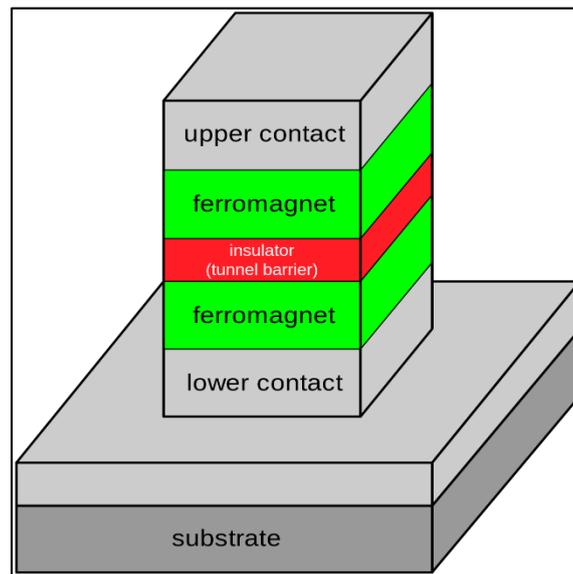


Figure I.8 : Schéma descriptif de la Magnétorésistance tunnel.

## I.4 Alliages Heusler

Les alliages Heuslers, appartenant à l'une des classes de matériaux intéressants sont intensivement utilisés dans les domaines thermoélectriques et de la spintronique. Leur histoire revient à l'année 1903, lorsque Fritz Heusler a découvert que l'alliage  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  se comporte comme un matériau ferromagnétique, bien qu'aucun de ses éléments constitutifs n'est magnétique [10].

### I.4.1 Formule chimique des alliages Heusler

Les alliages Heusler et demi Heusler ont les formules chimiques  $\text{X}_2\text{YZ}$  et  $\text{XYZ}$  respectivement, où X et Y sont des métaux de transition ou des terres rares, Y peut être aussi un métal alcalino-terreux mais Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique (un élément sp), comme il est représenté sur le tableau périodique des éléments par

des couleurs dans la figure I.9. Selon les couleurs, plusieurs alliages Heusler et demi Heusler peuvent être formés.

**X<sub>2</sub>YZ Heusler compounds**

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

Figure I.9: Répartition des éléments composants les alliages Heusler

Selon les sites atomiques occupés par les atomes X, Y et Z dans la maille élémentaire, l'alliage peut adopter différentes structures avec un désordre atomique (Figure I. 10).

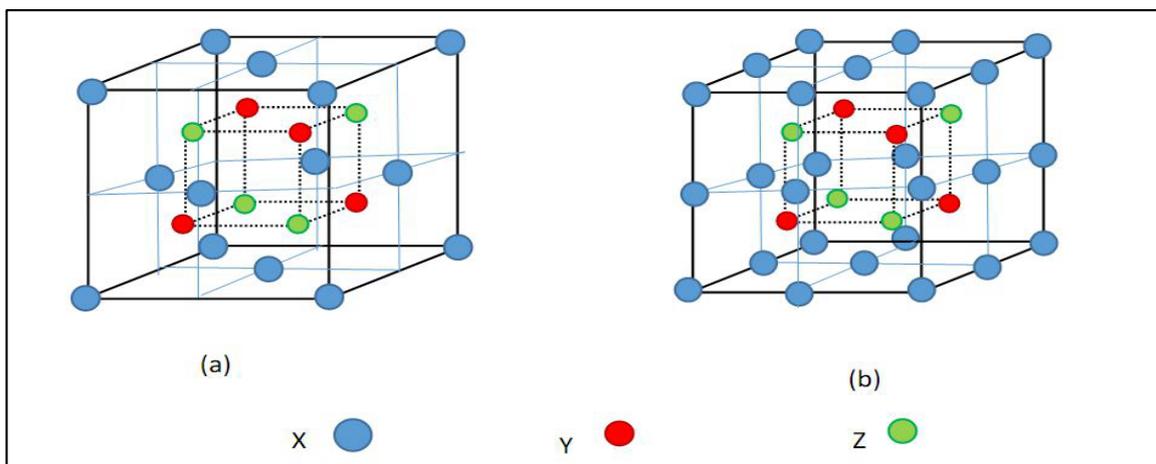


Figure I.10: Structure cristalline de demi-Heusler XYZ (a) et d'alliage Heusler X<sub>2</sub>YZ (b)

## I.5 Demi-métallicité des alliages Heusler

Dans les années quatre-vingt, les propriétés magnéto-optiques inhabituelles de plusieurs composés Heusler ont motivé l'étude de leur structure électronique, cela a conduit à un résultat inattendu.

Un demi-métal est un matériau qui se comporte comme un métal dans une des directions de spin («Spin-Up» ou bien «Spin-Down») et comme un isolant électrique ou un semi-conducteur dans la direction opposée [11]. Cette fonctionnalité est appelée le ferromagnétisme demi-métallique. Bien que les demi-métaux soient ferromagnétiques, par contre la plupart des substances ferromagnétiques ne sont pas des demi-métaux [12,13].

Le terme de demi-métallicité a été introduit pour la première fois par Groot et al [14] au début des années 1980 qui s'intéresse au calcul de la structure de bandes pour l'alliage demi-Heusler NiMnSb [15], seuls les électrons d'une orientation de spin donnée («up » ou « down ») ont le caractère métallique, tandis que les électrons de l'autre orientation de spin ont un comportement isolant ou celui d'un semi-conducteur.

**Bibliographie**

- [1] T.J.Seebeck, Abhandlungen der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin 265,1822 (1821).
- [2] J.C.Peltier, Annales de chimie 56, 371(1834).
- [3] W.Thomson, Mathematical and Physical Papers 1, 175 (1851).
- [4] V.Richoux « Elaboration électrochimique en mode pulse de Tellure de Bismuth  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  et de l'alliage ternaire  $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sbx})_2\text{Te}_3$  », Thèse de Doctorat, Université Paul Verlaine, Metz,2008.
- [5] M.Kishi, H.Nemoto, T.Hamao, M.Yamamoto, S.Sudou, M.Mandai, & S.Yamamoto, "Micro thermoelectric modules and their application to wristwatches as an energy source", In:Eighteenth International Conference on Thermoelectrics, Proceedings, ICT'99, IEEE, p. 301-307, 1999.
- [6] G.Bennett, "Space nuclear power: opening the final frontier. In the 4th International Energy Conversion Engineering Conference and Exhibit" (IECEC), p. 4191, 2006.
- [7] M.N.Baibich, et al. Physical review letters 61.21: 2472-2475 (1988).
- [8] M. Julliere. Physics Letters A, 54: pp. 225–226 (1975).
- [9] M. Johnson and R.H.Silsbee. Physical Review Letters, (54): 1790–1793(1985).
- [10] F.Heusler. Verh. d. DPG, 5: 219 (1903).
- [11] C.M. Fang, G.A. de Wjjs, R.A. de Groot, J Appl Phys 91 (2002) 8340.
- [12] Y.Miura, K.Nagao and M.Shirai, Phys.Rev, B 69, pp. 144413(1–7) (2004).
- [13] S.Chadov, X. Qi, J. Kübler, G.H. Fecher, C. S. Felser and S. C. Zhang, Nat. Mat, 9,pp. 541–545 (2010).
- [14] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G.van Engen and K.H.J. Buschow. Phys. Rev. Lett, 50, pp.2024–2027(1983).
- [15] K.Watanabe,Trans.Jpn.Inst.Met, 17,pp.220–226(1976).

***Chapitre II***  
***Méthodes de calcul***

---

## II.1 Introduction

Les méthodes de type ab-initio sont basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces méthodes permettent de déterminer les grandeurs physiques et chimiques d'un système telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation. Dans ce chapitre, nous allons exposer les méthodes utilisées pour la résolution de l'équation de Schrödinger avec ces différents niveaux d'approximations qui permettent de traiter des systèmes de taille important (système complexe).

Le calcul de ces propriétés à l'état fondamental d'un système à N électrons dans un cristal est très difficile, du fait que chaque particule interagit avec toutes les autres particules. Plusieurs approximations ont été proposées pour résoudre ce problème ; l'une des méthodes utilisées est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), les approches et les approximations utilisées et tout l'environnement du code Wien2K que nous utiliserons dans cette étude [1].

## II.2 Equation de Schrödinger

Pour un système de N électrons dans l'état stationnaire [2], l'équation de Schrödinger est donnée par la formule suivante:

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

E: est l'énergie totale de système.

$\Psi$ : est la fonction d'onde indépendante de temps.

H : est l'Hamiltonien

L'étude des propriétés électroniques des matériaux nécessite la résolution de cette équation.

La résolution de l'équation de Schrödinger est extrêmement difficile car elle contient N+M corps avec 3 positions dans l'espace de chaque corps. Donc il s'agit de suivre certaine

approximations pour obtenir la solution. La première approximation est l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer.

### II.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer [3], suppose que les électrons sont beaucoup moins lourds que les noyaux et que leur mouvement est beaucoup plus rapide, une première approximation prend en compte une évolution des électrons dans un potentiel créé par des atomes fixes [4].

Selon cette approximation, l'énergie cinétique des noyaux devient nulle ( $N_T=0$ ) et l'énergie d'interaction noyaux-noyaux devient constant, alors on peut simplifier l'Hamiltonien du système qui s'écrit comme suit :

$$H = T_e + T_N + V_{ee} + V_{NN} + V_{Ne} \quad (\text{II. 2})$$

$T_e$ : Énergie cinétique de N électrons de masse m

$T_N$ : Énergie cinétique des noyaux.

$V_{ee}$ : L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

$V_{NN}$ : L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

$V_{Ne}$ : L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électron.

La première approximation qui peut être introduite est l'approximation de Born-Oppenheimer.

$$H_T = T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (\text{II. 3})$$

### II.2.2 Approximation de Hartree et de Hartree-Fock

Dans l'approximation de Hartree [5, 6], On considère les électrons comme indépendants, dans lequel chaque électron se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons, désignant par l'énergie potentielle de l'électron dans ce champ, à chaque électron correspond une orbitale et la fonction d'onde totale s'écrit comme un produit de fonction d'onde mono-électronique, de sorte que [7]:

$$\Psi = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \Psi_3(r_3) \dots \dots \Psi_n(r_n) \quad (\text{II. 3})$$

L'approximation de Hartree-Fock permet de réduire le problème de N corps à un problème d'un seul corps, ou chaque électron soumis à un potentiel effectif généré par les autres

électrons. Notamment pour les systèmes du plusieurs électrons le calculs doit être difficiles, pour cela on recourt à la théorie de la fonctionnelle de la densité.

### II.2.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

L'idée principale de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est que l'énergie d'un système d'électrons peut être exprimée en fonction de la densité électronique  $\rho(r)$ . Pour un système de  $N$  électrons,  $\rho(r)$  correspond à la densité électronique au point de l'espace  $r$  [8]. La DFT est basée sur deux théorèmes fondamentaux introduits par Hohenberg et Kohn et ensuite étendus par Kohn et Sham [9, 10].

#### II.2.3.1 Modèle de Thomas-Fermi

L'avantage de ce modèle que la densité ne dépend pas des trois coordonnées spatiales des électrons de système étudié [11, 12]. Ce modèle comportait quelques points faibles, car quantitativement il décrivait mal les propriétés des molécules et des solides. Slater, Hohenberg et Kohn ont proposé une théorie exacte et plus élaborée, c'est la DFT qui est la méthode déterminant la densité de l'état fondamental. La DFT peut traiter de nombreux types de problèmes et d'être suffisamment précise.

#### II.2.3.2 Equations de Kohn-Sham

Kohn et Sham [13] ont démontré que la densité électronique exacte était donnée par une solution auto-cohérente d'un ensemble d'équations mono-électroniques, de type Schrödinger, appelées équations de Kohn-Sham:

$$\rho(r) = \sum_i |\Psi(r)|^2 \quad (\text{II. 4})$$

Les particules étant indépendantes, les fonctions d'ondes associées sont orthogonales et l'Hamiltonien est symétrique.

La fonctionnelle de Kohn-Sham s'écrit :

$$E_{KS}(n) = T_{KS} + E_H(n) + E_{xc}(n) + \int V_{ext}(r)n(r)dr \quad (\text{II. 6})$$

Avec  $T_{KS}$  l'énergie cinétique.

$$T_{KS} = \sum_{i=1}^N \left\langle \Psi_i \left| \frac{\nabla^2}{2} \right| \Psi_i \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \Psi_i(r)|^2 \quad (\text{II. 7})$$

$E_H$  L'énergie d'Hartree :

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (\text{II. 8})$$

### II.2.4 Energie d'échange et corrélation

La partie inconnue dans la fonctionnelle densité  $E(\rho)$  à été réduite à la fonctionnelle universelle  $F_{HK}(\rho)$  et finalement à une énergie d'échange et de corrélation  $E_{xc}(\rho)$ . L'énergie d'échange et corrélation regroupe donc deux termes : cinétiques et électrostatiques non classiques. Les interactions inter électroniques d'ordre purement quantiques gouvernées par le spin, doivent être prises en compte dans  $E_{xc}$ .

Les fonctions d'onde  $\Psi$  sont alors obtenues par la solution d'une équation de type *Schrödinger* avec un potentiel effectif :

$$H_{KS}\Psi_i(r) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff} \right] \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (\text{II. 9})$$

Avec :

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \quad (\text{II. 10})$$

Et :

$$V_H(r) = \frac{\delta E_H[n]}{\delta n} = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' \quad (\text{II. 11})$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\rho(r)} \quad (\text{II. 12})$$

Où on définit le terme d'échange et de corrélation :

$$E_{xc}[n(r)] = \{V_{ee}[n(r)] - E_H[n(r)]\} + \{T[n(r)] - T_s[n(r)]\} \quad (\text{II. 13})$$

$E_{xc}[n(r)]$  Comprend la correction à l'énergie cinétique pour un gaz d'électrons en interaction et la correction à l'énergie de Hartree dans l'interaction électron-électron.

La bonne description de la densité électronique du système de particules devient alors totalement dépendante de la qualité de la fonctionnelle et de sa partie échange-corrélation.

D'une part cette fonctionnelle va permettre de prendre en compte l'énergie d'échange d'Hartree-Fock et d'autre part elle va prendre en compte l'énergie de corrélation entre les électrons.

### II.2.4.1 Approximation du gradient généralisé (GGA)

Dans le cadre de la GGA [14], la contribution de chaque unité de volume à l'énergie d'échange-corrélation du système ne dépend pas seulement de la densité locale au sein de ce volume, mais également de la densité au sein des autres volumes voisins. L'énergie d'échange-corrélation sera donc exprimée en fonction de la densité électronique mais aussi du gradient de celle-ci :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3\vec{r} \quad (\text{II. 14})$$

$\varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|]$  : représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme.

Où  $f$  est une fonctionnelle de la densité locale et son gradient dépendante de la densité électronique et de son gradient. L'approximation GGA donne des meilleurs résultats pour les énergies totales, les énergies de cohésion, les volumes à l'équilibre et les modules de compressibilité.

### II.2.4.2 Approximation du potentiel modifié (MBJ)

L'approximation GGA sous-estime le gap de plusieurs semi-conducteurs et isolants. Pour avoir de meilleurs résultats pour les calculs du gap, Tran et Blaha [15] ont proposé récemment l'utilisation d'une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson [16] (d'où on l'appelle modified Becke-Johnson mBJ) dans la DFT. Le potentiel de Becke-Johnson s'écrit comme suit :

$$V_{X,\sigma}^{BJ}(r) = V_{X,\sigma}^{BR}(r) + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{6}} \sqrt{\frac{t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (\text{II. 15})$$

Avec

$V_{X,\sigma}^{BJ}(r)$  est le potentiel modifié (TB-mBJ).

$\rho_{\sigma}(r)$  est la densité électronique.

$t_{\sigma}(r)$  est la densité de l'énergie cinétique.

### II.3 Code Wien2k

La méthode FP-LAPW a été implémentée dans le code WIEN, un ensemble de programmes élaborés par *Blaha*, *Schwarz* et leurs collaborateurs [17]. Ce code a permis de traiter avec succès des systèmes supraconducteurs à haute température [18], des minéraux, des surfaces des métaux de transition ou encore des oxydes non ferromagnétiques [19]. Il existe plusieurs versions du code WIEN dont le WIEN97 qui a été par la suite amélioré pour donner le WIEN2k [20]. La structure de ce code est constituée de plusieurs sous-programmes indépendants, liés par un script de type C-Shell (figure II.4).

La procédure de calcul ab-initio dans le code WIEN2k se divise en deux étapes majeures. Dans un premier temps, l'initialisation consiste à générer la densité électronique de départ, à partir d'un calcul atomique. Différentes opérations sont alors effectuées grâce à l'ensemble de sous-programmes suivant :

- **NN** fournit les distances entre plus proches voisins et les positions équivalentes afin de déterminer le rayon atomique de la sphère Muffin-Tin.
- **LSTART** permet de générer les densités atomiques et détermine également comment les différentes orbitales atomiques sont traitées dans le calcul de la structure de bandes (états de coeur ou de valence).
- **SYMMETRY** permet de générer les opérations de symétrie du groupe spatial et de déterminer le groupe ponctuel des sites atomiques individuels.
- **KGEN** génère une maille de points  $k$  dans la zone de Brillouin.
- **DSTART** génère une densité de départ pour le cycle auto-cohérent (le cycle SCF) par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Dans un second temps, les énergies et la densité électronique de l'état fondamental sont calculées au cours d'un cycle auto-cohérent (ou self-consistent, noté SCF). Ce cycle est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence (sur l'énergie, la densité de charge, les forces, etc...) soit atteint. Un second ensemble de sous programmes est alors utilisé :

- LAPW0** génère le potentiel de Poisson pour le calcul de la densité.
- LAPW1** calcule les bandes de valences, les valeurs propres et les vecteurs propres.
- LAPW2** calcule les densités de valence pour les vecteurs propres.
- LCORE** calcule les états et les densités de cœur.
- MIXER** effectue le mélange des densités d'entrée et de sortie du cycle  $i$  et du cycle  $i$

-1.

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

## **II.4 Méthodologie de calcul**

Dans notre travail, les calculs sont effectués en utilisant le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2K [21]. Le potentiel de corrélation d'échange a été traité en utilisant l'approximation de gradient généralisée (GGA) dans le paramétrage de Perdew- Burke-Ernzerhof (PBE) [22]. Les rayons muffin tin (RMT) ont été choisis pour assurer la proximité des sphères et minimiser l'espace interstitiel.  $RMT \times K_{max} = 8$  (où  $K_{max}$  est l'amplitude du plus grand vecteur  $K$  dans l'onde plane et RMT est le rayon moyen des sphères de muffin tin) a été utilisé pour le nombre d'ondes planes et l'expansion des fonctions d'onde a été fixé à  $l_{max} = 10$  à l'intérieur des sphères de muffin tin, tandis que la densité de charge a été étendue à Fourier jusqu'à  $G_{max} = 12 \text{ au}^{-1}$ , où  $G_{max}$  est le plus grand vecteur dans l'expansion de Fourier. L'énergie de séparation a été choisie comme  $-6 \text{ Ry}$ , ce qui définit la séparation des états de valence et les états de coeur. Nous avons effectué l'intégration sur les points  $k$  spéciaux de la zone de Brillouin de  $(14 \times 14 \times 14)$  avec 2000  $k$ -points, où la convergence auto-cohérente de l'énergie totale était de  $10^{-6} \text{ Ry}$ .

## **II.5 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principales méthodes et les approximations utilisées en vue de résoudre l'équation de Schrödinger. Dans ce chapitre, nous avons abordé aussi le formalisme de la DFT, formalisme basé sur la densité électronique comme une variable de base au lieu de la fonction d'onde. Le principe de la DFT nécessite de connaître la forme exacte de l'énergie d'échange afin d'obtenir une densité électronique aussi exacte ; le fait est que plus la connaissance de l'énergie d'échange est précise, plus la densité sera connue avec précision. Finalement, nous avons aussi décrit le code WIEN2k avec le fonctionnement de ces sous-programmes où l'ensemble de ces packages est un outil d'exploitation fondamental de la méthode FP-LAPW. Cette dernière serait utilisé dans le prochain chapitre pour étudier les propriétés structurales, électroniques, thermodynamiques et thermoélectriques de notre matériau.

**Bibliographie**

- [1] O.Allal, Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques de l'Oxyde de Magnésium (MgO), Thèse de doctorat, université Mohamed Bodiaf, Oran, 2010.
- [2] H. Zenasni, Etude théorique des propriétés Magnétiques, électroniques et structurales des alliages Heusler, Thèse de doctorat, Université de ABOU BAKR BELKAID, Telemcen, 2013.
- [3] H.A. Goodwin, Top. Curr. Chem. **234** (2004).
- [4] Y. Garcia, P. Gütllich, Top. Curr. Chem. **234** (2004) 49.
- [5] D.R.Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. **24**, **89** (1928).
- [6] J.E. Enderby, A.C. Barnes, Rep. Prog. Phys. **53** (1990) 85.
- [7] B. E. Mellander, Phys. Rev. B **26**, (1982) 5886.
- [8] K.Hamar. Etude «ab initio» des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des couches d'alliages FePt L10, mémoire de master académique, Université de MOULOUD MAMMERI, Tizzi Ouezzo.
- [9] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev. **1**, **36**, B 864 (1964).
- [10] W. Kohn et L.J Sham, Phys. Rev. **140**, A1113 (1965).
- [11] L.H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 542 (1927).
- [12] E. Fermi, Z. Phys. Rev. **53**, (1951).
- [13] Kohn, W. and L.J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Physical Review, 1965. **140**(4A): p. A1133-A1138.
- [14] Perdew, J.P. and A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. Physical Review B, 1981. **23**(10): p. 5048-5079.
- [15] F. Tran, P. Blaha. Phys. Rev. Lett. **102**: 226401-226404 (2009).
- [16] A.D. Becke, E.R. Johnson. J. Chem. Phys. **124**: 221101-221104 (2006).
- [17] Winkler, B., P. Blaha, and K. Schwarz, Ab-initio calculation of electric-field-gradient tensors of forsterite. American Mineralogist, 1996. **81**: p. 545-549.
- [18] Kohler, B., et al. Frustrated H-Induced Instability of Mo(110). Physical Review Letters, 1995. **74**(8): p. 1387-1390.
- [19] Wang, X.G., et al. The Hematite (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) (0001) Surface: Evidence for Domains of Distinct Chemistry. Physical Review Letters, 1998. **81**(5): p. 1038-104.

- [20] Blaha, P., et al. Wien2k User's guide in An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, T.U. Wien, Editor. 2001: Vienna.
- [21] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran, L.D. Marks, Wien2k, An augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties, Vienna University of Technology, (2018).
- [22] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865.

***Chapitre III***  
***Résultats et discussions***

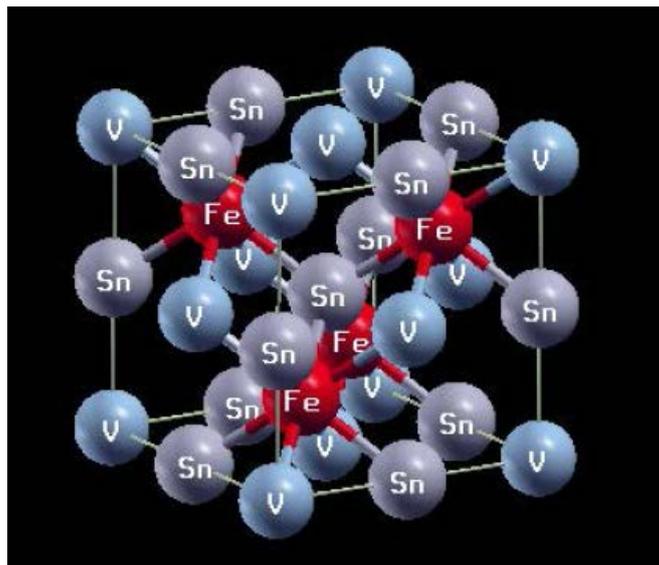
---

### III.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons une étude détaillée sur les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, thermodynamiques et thermoélectriques du composé Heusler FeVSn. Cette étude théorique, a été effectuée en utilisant l'approximation de gradient généralisée (GGA-PBE) et le potentiel de Becke-Johnson modifié récent (TB-mBJ) de Tran-Blaha [1, 2] qui améliore les calculs des propriétés électroniques [3-5].

### III.2 Propriétés structurales

La détermination des propriétés structurales est une première étape fondamentale dans tout calcul, leur détermination nous donne plus d'informations sur les propriétés du matériau à étudier, et ceci avant d'accéder aux autres propriétés physiques (électroniques, magnétiques). La structure d'un matériau demi Heusler peut être caractérisée par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont la structure cristalline de FeVSn est schématisée dans la Figure III.1.



**Figure III.1:** Structure cristalline du matériau FeVSn

Les propriétés structurales de l'état fondamental du matériau Heusler ont été déterminées via le fit de l'énergie totale de notre cristal en fonction du volume schématisé sur la figure III.2.

Pour notre composé, la configuration de type I dans la phase ferromagnétique (FM) devrait être l'état le plus stable d'où la courbe (E-V) présente un minimum.

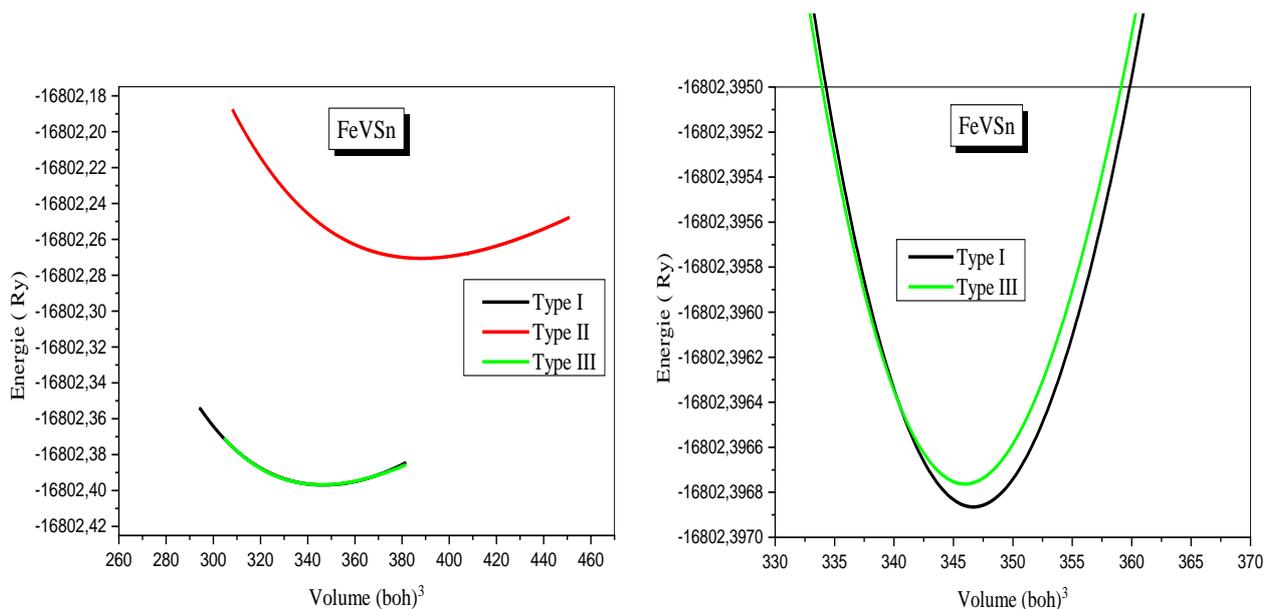


Figure III. 2: Variation de l'énergie totale en fonction du volume du composé FeVSn

Pour obtenir les propriétés structurales pour trois types de structure: I, II et III (voir Tableau III.1).

Tableau III.1 : Trois configurations possibles pour le composé FeVSn.

	4a (X)	4b (Y)	4c (Z)
<b>Type I</b>	(1/4,1/4,1/4)	(0,0,0)	(1/2,1/2,1/2)
<b>Type II</b>	(0,0,0)	(1/2,1/2,1/2)	(1/4,1/4,1/4)
<b>Type III</b>	(1/2,1/2,1/2)	(1/4,1/4,1/4)	(0,0,0)

Les paramètres structuraux obtenus à l'équilibre statique (0K et 0GPa) pour le type I sont présentés dans le tableau III.2.

**Tableau III. 2 :** Le paramètre de réseau  $a$  ( $\text{Å}$ ), le module de compressibilité  $B$  (Gpa), sa première dérivée de pression  $B'$ , le volume  $V$  ( $\text{bohr}$ )<sup>3</sup> et l'énergie totale minimale  $E$  (Ry).

Type	$a$	B	$B'$	$V$	$E$
Type I	5.92	99.01	4.87	346.376	-16802.40
Type II	6.13	91.56	4.95	388.818	-16802.27
Type III	5.89	112.99	4.98	346.039	-16802.38
Autre travail [6]	5.90				-16802.51

### III.3 Propriétés électroniques

L'étude des propriétés électroniques prennent une place très importante du fait qu'elles nous permettent d'analyser et de comprendre la nature du matériau étudié. Dans notre travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des structures de bandes d'énergie de l'alliage FeVSn par les deux approches GGA-PBE et MBJ.

#### III.3.1 Structure de bandes

La structure électronique des bandes du composé FeVSn est calculée selon les directions de symétrie dans la première zone de Brillouin (ZB) à 0 GPa avec les paramètres de maille les plus optimisés en utilisant les deux approximations GGA-PBE et la TB-mBJ. Nos résultats sont illustrés dans la figure (III.3), pour les spins majoritaires (up) et minoritaires (dn).

Nous avons noté que les deux canaux de spin minoritaire et spin majoritaire sont métallique par la méthode GGA, alors que dans le spin majoritaire il y a un gap indirect W-X pour FeVSn autour du niveau de Fermi d'environ 0,80 eV par l'approche MBJ. Cela confirme que notre matériau est un ferromagnétique demi-métallique (FDM) avec un demi-gap de 0,2 eV. L'approche MBJ est une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson, son application a trouvé rapidement une grande efficacité pour donner des résultats pour les gaps énergétiques très proches de l'expérience [7]. Il faut noter que la modification apportée par la TB-mBJ apparait surtout dans les matériaux contenant des métaux de transitions. Ce caractère demi-métallique (HM) rend ces matériaux exploitables dans les applications de la spintroniques. Nos résultats sont en accord avec ceux trouvés par M. Atif Sattar et al. (Gap= 0,83 eV avec un demi-gap de 0,23 eV) [6].

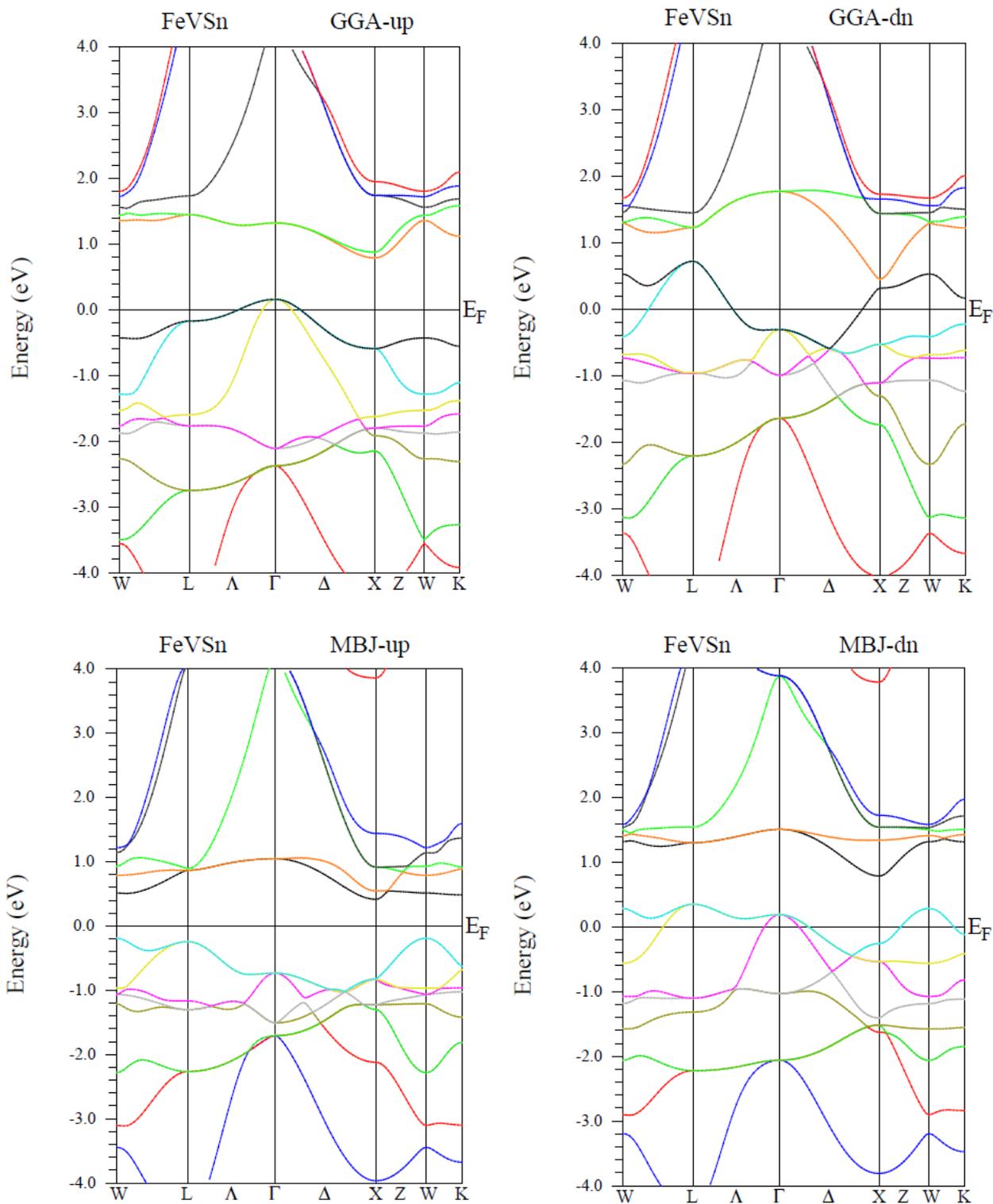


Figure III.3: Structure de bande du FeVSn (up/dn) obtenue par GGA et MBJ.

### III.4 Propriétés magnétiques

Afin de déterminer le comportement magnétique du demi-Heusler FeVSn, nous avons calculé les moments magnétiques total et partiels en utilisant les deux approximations GGA et MBJ (Tableau III. 3).

Nous observons que La principale contribution du moment magnétique total ( $\mu_{tot}$ ) provient de l'atome Fe avec un moment magnétique partiel de 1.62 et 1.64  $\mu_B$ , respectivement par GGA et MBJ.

En plus, le moment magnétique total  $M_{tot}$  de l'alliage FeVSn a une relation linéaire avec le nombre des électrons de valence ( $Z_{tot}$ ) obéissant à la règle de Slater – Pauling [8].

$$M_{tot} = 18 - Z_{tot} \quad (III.1)$$

Où FeVSn a 17 électrons de valence : Fe ( $3d^6 4s^2$ ), V ( $3d^3 4s^2$ ) et Sn ( $4s^2, 4p^2$ ).

Selon l'équation (III.1), le  $M_{tot}$  obtenu est égal à 1  $\mu_B$  pour FeVSn par l'approche MBJ, ce qui est en bon accord avec les résultats calculés du tableau III.3.

**Tableau III. 3** Moment magnétique total et partiel en ( $\mu_B$ ) du FeVSn.

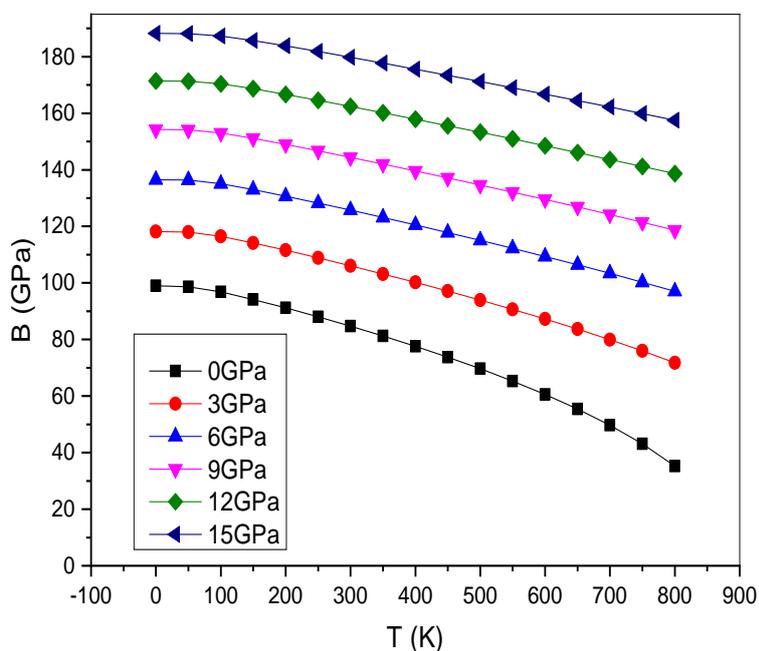
FeVSn	$\mu_{Fe}$	$\mu_V$	$\mu_{Sn}$	$\mu_I$	$\mu_{tot}$
<b>GGA</b>	1.62	-0.67	0.016	-0.006	0.96
<b>MBJ</b>	1.64	-0.66	0.019	-0.004	1.00
<b>Autre travail [6]</b>	1.40	-0.43	0.011	-0.001	0.98

### III.5 Propriétés thermodynamiques

Dans cette partie nous sommes intéressés à l'étude des propriétés thermodynamiques, pour étendre nos connaissances sur les comportements spécifiques des matériaux étudiés lorsqu'ils sont soumis à un environnement à haute pression et à haute température. Les propriétés thermodynamiques sont déterminées dans la gamme de températures allant de 0 à 800 K et en variant la pression de 0 à 15 GPa avec un pas de 3 GPa et en utilisant le modèle quasi harmonique de Debye [9, 10] mis en œuvre dans le code Gibbs.

### III.5.1 Module de compressibilité (B)

Le module de compressibilité représente la résistance du matériau au changement de volume lorsqu'il est comprimé. L'évolution du module de compressibilité avec la température et la pression est exhibée dans la figure III.4 du composé FeVSn.



**Figure III. 4:** Variation du module de compressibilité B en fonction de la température de FeVSn.

Le module de compressibilité est presque constant dans la gamme de température de 0 jusqu'à 100K, mais quand la température s'élève à  $T > 100K$ , le module de compressibilité diminue. La même tendance est observée pour diverses valeurs de pression. Le module de compressibilité s'accroît presque linéairement avec la pression pour toute température donnée. Donc, la compressibilité décroît avec la croissance de la température à une pression donnée et augmente avec la pression à une température donnée. En conclusion, la dureté de ce matériau décroît avec l'augmentation de la température et elle s'accroît quand il est comprimé. Le calcul de module de compressibilité B à pression zéro et température zéro est de 98.75 GPa pour FeVSn, indiquant que cette valeur est en bon accord avec celle calculée à partir des propriétés structurales.

### III.5.2 Volume (V)

Les relations entre le volume (V) et la température (T) à différentes pressions sont illustrées à la figure III.5. On constate que le volume diminue quasi-linéairement avec la hausse de la pression pour les différentes températures considérées, ce qui signifie que le taux de croissance du paramètre de maille du réseau cristallin décroît significativement quand la pression augmente. Nous remarquons aussi que pour une température donnée le volume de la cellule diminue avec l'augmentation de la pression. À 0 K et 0 GPa, la valeur calculée du volume pour FeVSn est de  $346,71 \text{ bohr}^3$ ; cette valeur confirme l'autre que celle obtenue en propriétés structurales.

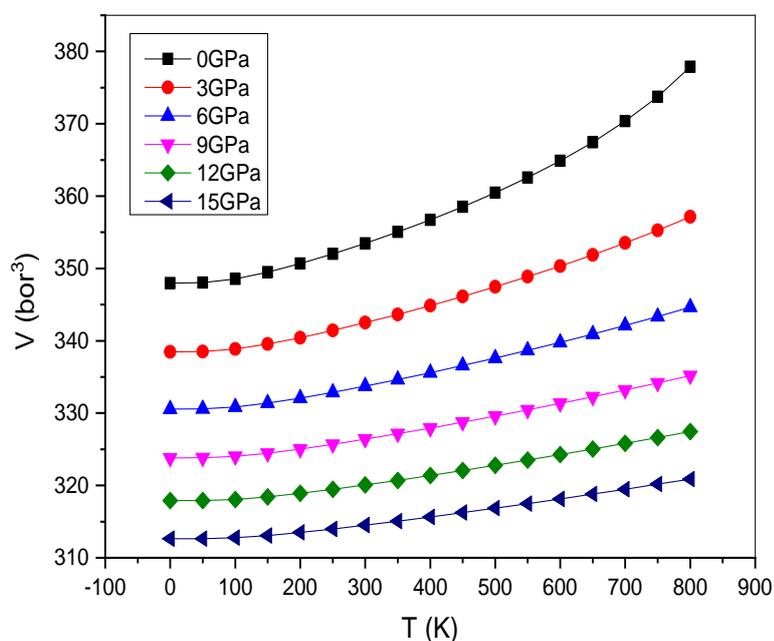
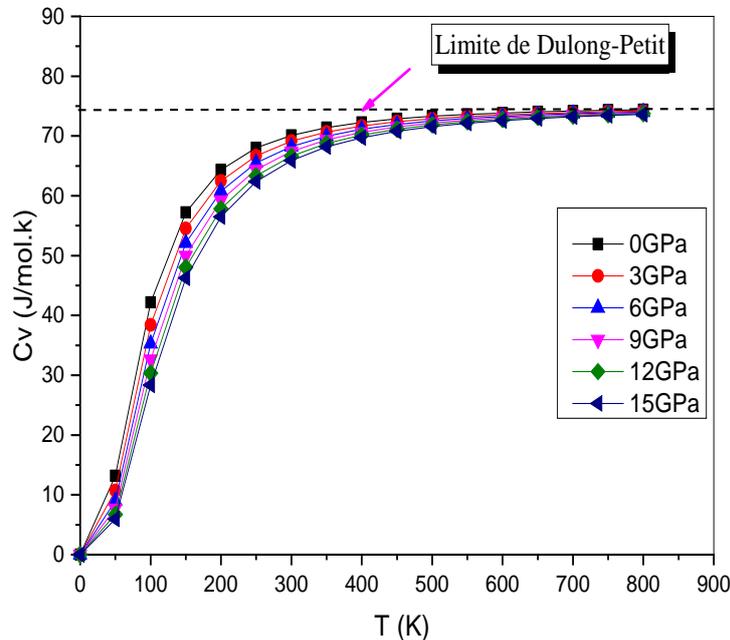


Figure III. 5: Variation du volume V en fonction de la température de FeVSn.

### III.5.3 Capacité thermique à volume constant (Cv)

La capacité thermique  $C_v$  est une grandeur physique mesurable qui exprime la possibilité qu'un corps à absorber ou restituer de l'énergie par échange thermique au cours d'une transformation pendant la variation de sa température. L'évolution de la capacité thermique à volume constant  $C_v$  sous l'effet de la température pour différentes pressions est schématisée sur la figure III.6. La chaleur spécifique  $C_v$  augmente de façon exponentielle jusqu'à 300 K. Les valeurs sont purement prédictives puisque nous ne disposons aucune donnée

expérimentale. À hautes températures, la croissance devient faible jusqu'à une valeur constante (à  $T > 600$  K) qui correspond à la limite de Dulong-Petit [11]. Ce comportement est commun à tous les solides à haute température [12]. On peut également observer à partir les mêmes courbes que les effets de température et de pression sur les capacités calorifiques  $C_v$  sont opposés. La valeur de  $C_v$  obtenue à  $T = 300$  K et  $P = 0$  GPa est égale à  $70.32 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$  pour FeVSn.



**Figure III. 6:** Variation de la capacité thermique  $C_v$  en fonction de la température de FeVSn.

### III.5.4 Température de Debye ( $\theta_D$ )

La température de Debye  $\theta_D$  est également un paramètre thermodynamique très important qui est essentiellement lié à une mesure de la réponse vibratoire d'un matériau.

Elle est définie comme la température maximale qui peut provoquer une vibration normale des atomes du réseau. La température de Debye  $\theta_D$  en fonction de la température est schématisée sur la figure III.7 où elle est presque constante de 0 jusqu'à 100K, puis elle diminue linéairement aux températures supérieures à 100K. Il convient également de noter qu'en fixant la température, la température de Debye  $\theta_D$  augmente linéairement avec la pression appliquée, ce qui rend son comportement en fonction de la température et la pression est semblable à celui du module de compressibilité  $B$ . Le calcul de la température de Debye  $\theta_D$  à  $P=0$  GPa et  $T=0$  K est de 360.45 K pour notre matériau.

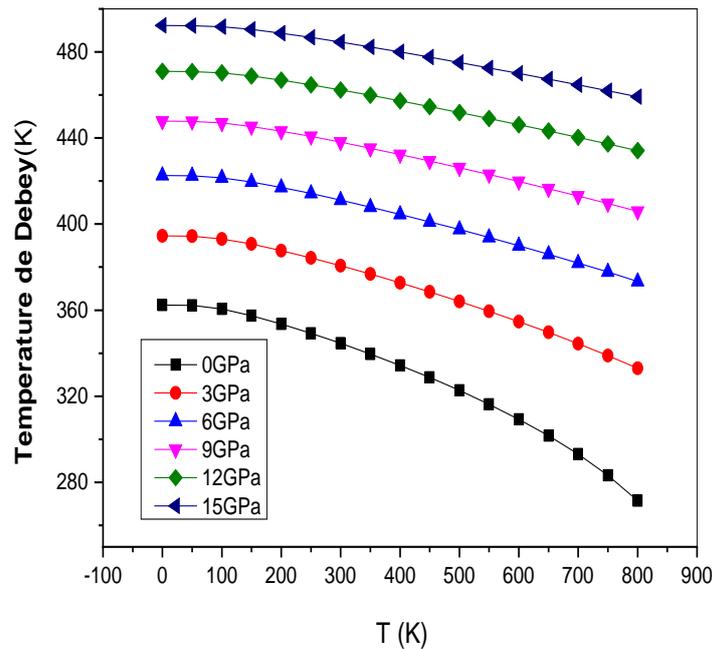


Figure III. 7: Variation de la température de Debye  $\theta_D$  en fonction de la température de FeVSn.

### III.5.5 Entropie (S)

La variation de l'entropie  $S$  en fonction de la température et de la pression pour le composé FeVSn est représentée par le tracé de la figure III. 8. Nous constatons qu'à 0K, l'entropie est nulle pour toute valeur de pression. Avec l'augmentation de la température, l'entropie augmente exponentiellement et en même temps elle augmente avec l'augmentation de la pression. La valeur d'entropie obtenue à température ambiante et à pression de 0GPa est 91.52 J/mol.K. Cette petite valeur d'entropie indique que notre alliage demi-Heusler est hautement ordonné. Pour des températures dépassant les 600K les valeurs d'entropies augmentent progressivement, ce changement d'entropie est dû à l'augmentation du mouvement vibrationnel des atomes avec la température conduisant à l'augmentation de l'énergie interne du système.

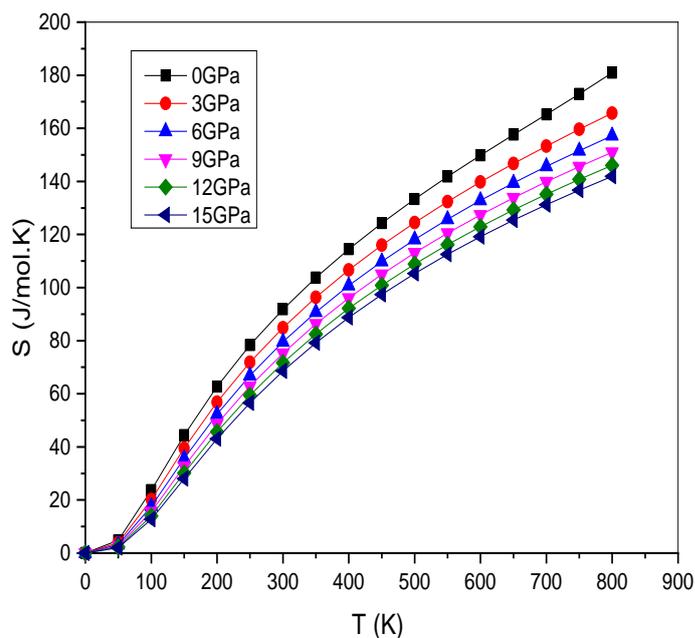


Figure III. 8: Variation de l'entropie  $S$  en fonction de la température de FeVSn.

### III.5.6 Coefficient de dilatation thermique ( $\alpha$ )

Le coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  exprime la correspondance entre le volume du matériau et la température qu'il subit. La variation du coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  en fonction de la température à diverses pressions est schématisée dans la figure III.9. On observe que  $\alpha$  augmente avec la température jusqu'à 300 K et devient ensuite constant au-delà de cette température. De ce fait, les hautes températures n'influent pas sur le coefficient de dilatation thermique, tandis que la variation de pression montre l'effet opposé, à savoir que  $\alpha$  diminue avec l'augmentation de la température en raison de la compression de la structure des deux matériaux. La variation de  $\alpha$  avec la température devient plus petite lorsqu'on augmente la pression. En fixant la température, la dilatation thermique diminue presque linéairement avec la croissance de la pression et elle est très faible à des températures plus élevées et à des pressions plus élevées aussi. Le coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  à 300 K et à la pression nulle est de  $8,65 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  pour FeVSn.

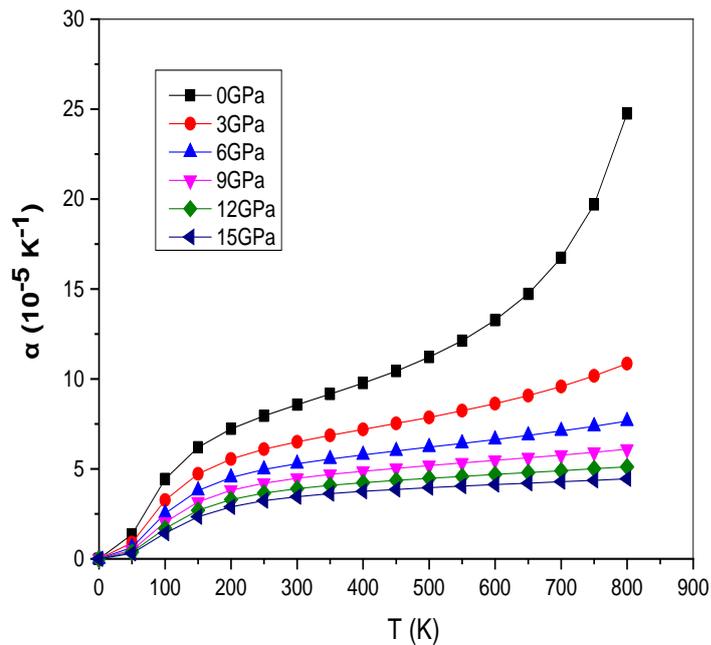


Figure III. 9: Variation du coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  en fonction de la température de FeVSn.

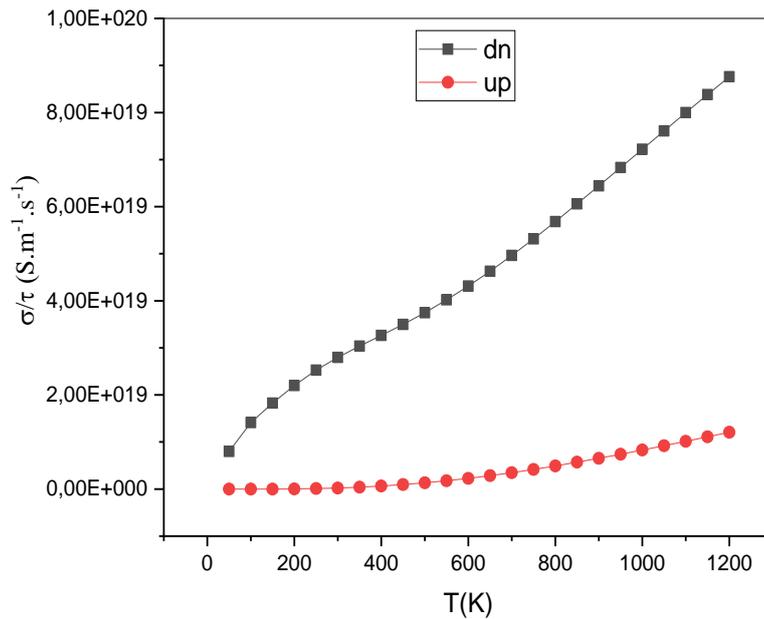
### III.6 Propriétés thermoélectriques

L'attention envers les matériaux thermoélectriques s'est développée dans le monde entier parce qu'ils sont capables de convertir de l'énergie thermique en énergie électrique ou pour fournir une réfrigération directement à partir de l'énergie électrique [13, 14]. L'efficacité des matériaux trouve une demande énorme en thermoélectrique à travers leur production d'énergie, diélectriques et leur capacités de réfrigération. Les propriétés de transport du composé FeVSn ont été calculées à l'aide du code BoltzTrap [15] avec 500000 k-points. Cette partie du travail est consacrée à l'étude des différents coefficients de transport de notre composé dans les deux états spin majoritaire et spin minoritaire de composé FeVSn, tels que la conductivité électrique ( $\sigma / \tau$ ), la conductivité thermique électronique ( $K_e / \tau$ ) et le coefficient de Seebeck ( $S$ ) ainsi que le facteur de mérite  $ZT$ .

#### III.6.1 Conductivité électrique ( $\sigma/\tau$ )

La conductivité électrique  $\sigma/\tau$  ( $\tau$  : temps de relaxation =  $10^{-15}$  s) est une propriété fondamentale d'un matériau. Elle caractérise l'aptitude d'un matériau à laisser les charges électriques se déplacer librement et donc permettre le passage d'un courant électrique. Pour un bon dispositif thermoélectrique, les matériaux doivent avoir une conductivité électrique élevée [16].

La variation de la conductivité électrique pour FeVSn en fonction de la température est illustrée dans la figure III.10. Nous constatons que la conductivité électrique calculée pour l'état de spin majoritaire (up) varie très légèrement avec la température dans l'intervalle  $50 < T < 1200 \text{ K}$ . Ce résultat est en bon accord avec son caractère semi-conducteur déjà constaté dans le tracé de sa structure de bande électronique. Pour l'état de spin minoritaire (down), une augmentation très importante de la conductivité électrique est enregistrée. Cette augmentation est due au comportement métallique dans cette direction. Au voisinage de la température ambiante (300 K) la valeur de la conductivité électrique est de  $2.8 \cdot 10^{19} \text{ S}^{-1} \text{ m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .



**Figure III. 10.** Evolution de la conductivité électrique en fonction de la température de FeVSn.

### III.6.2 Coefficient de Seebeck (S)

La description des propriétés thermoélectriques passe par le calcul du coefficient de Seebeck (S) qui reste un test sensible de la structure électronique des matériaux au voisinage du niveau de Fermi. La figure III.11 donne l'évolution de ce coefficient en fonction de la température.

Le demi-Heusler FeVSn présente un coefficient négatif pour les spins up et dn. A 0GPa et 300K, les coefficients de Seebeck sont  $-440 \mu\text{V}$  et  $-210 \mu\text{V}$  pour les spins up et dn, respectivement. Le signe négatif du coefficient de Seebeck suggère une conduction du matériau faite par des porteurs de charge négatifs (les électrons), d'où ce matériau est de type n.

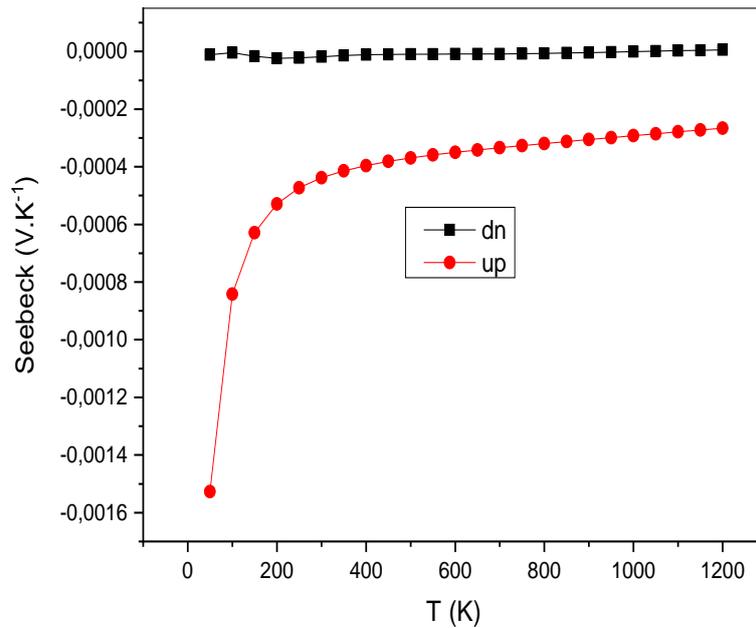


Figure III. 11 : Evolution du coefficient de Seebeck en fonction de la température de FeVSn.

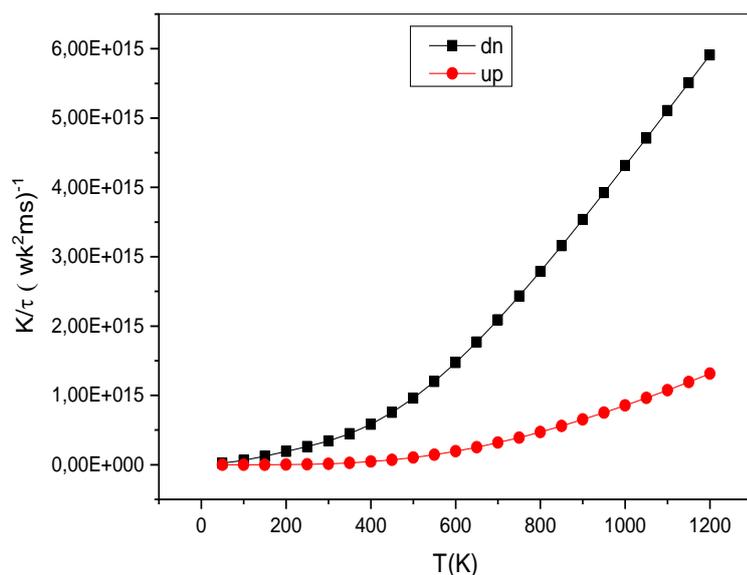
### III.6.3 Conductivité thermique ( $K/\tau$ )

La conductivité thermique est principalement composée de deux conductivités : la conductivité électronique ( $K_e$ ) et la conductivité thermique du réseau ( $K_l$ ) tel que :

$$K = K_e + K_l \quad (\text{III.1})$$

Dans cette étude, seulement l'évaluation de la contribution électronique ( $K_e$ ) de la conductivité thermique a été effectuée, par le code BoltzTraP, d'où ( $K_l$ ) est négligeable [17].

L'évolution de la conductivité thermique en fonction de la température est donnée par la figure III.12. Avec l'augmentation de la température, on remarque un accroissement de la conductivité thermique selon un profil quasi-linéaire. Les valeurs de la conductivité thermique à 300 K correspondent aux  $3.27 \times 10^{13} \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1}$  et  $3.60 \times 10^{14} \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , respectivement, pour les deux spins up et dn.



**Figure III. 12 :** Evolution de la conductivité thermique en fonction de la température de FeVSn.

#### III.6.4 Facteur de mérite ( $ZT$ )

Afin de quantifier l'efficacité thermoélectrique des composés étudiés dans ce travail, nous avons calculés la variation du facteur de mérite sur une plage de température allant de 50 jusqu'à 1200 K. Pour les deux états spin majoritaires (up) et spin minoritaires (down), le facteur de mérite  $ZT$  est présenté dans la figure III.13.

Pour l'état spin minoritaire, la valeur de  $ZT$  de composé FeVSn augmente légèrement avec la température. La valeur de  $ZT$  à 300 K est 0,0068 ce qui est vraiment faible en raison de son grande conductivité thermique. Alors que pour l'état majoritaire (up), la valeur de  $ZT$  diminue avec l'augmentation de la température. Les valeurs de  $ZT$  sont proche l'unité dans un large domaine de température de 0.995 (50K) à 0.851 (800K), ce qui confirme que ce matériau est un bon candidat pour des applications thermoélectriques.

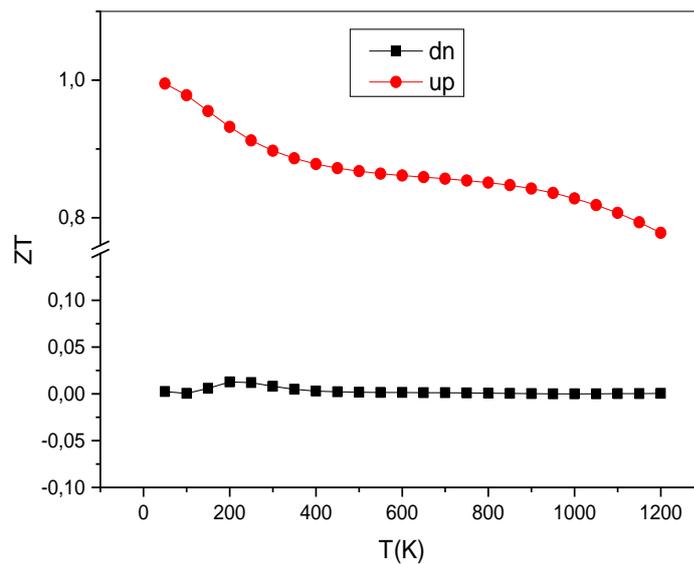


Figure III. 13 : Evolution du facteur de mérite en fonction de la température de FeVSn.

### III.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié en détail les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, thermodynamiques et thermoélectriques du demi Heusler FeVSn, grâce à son intérêt technologiques et industriels. Les résultats montrent que notre composé est demi-métallique ferromagnétique avec un moment magnétique de  $1\mu\text{B}$ . Par conséquent ; ce matériau est un bon candidat pour les applications spintroniques et thermoélectriques.

**Bibliographie**

- [1] Tran, F., Blaha, P.: Phys. Rev. Lett. 102, 226401 (2009)
- [2] Koller D., Tran, F., Blaha, P.: Phys. Rev. B 83, 195134 (2011)
- [3] Singh, D.J.: Phys. Rev. B 82, 205102 (2010)
- [4] Gong, S., Liu, B.G.: Phys. Lett. A 375, 1477 (2011)
- [5] Guo, S.D., Liu, B.G.: Chin. Phys. B 21, 017101 (2012)
- [6] M. Atif Sattar a, Muhammad Rashid b,n, M.RazaHashmi a, M.NasirRasool a, Asif Mahmood c, S.A.Ahmad. Mater. Sci. Semicond. Process. 51, 48 (2016).
- [7] Rai, D. P., Shankar, A., Ghimire, M. P., Khenata, R. and Thapa, R. K. A first principles study of Nd doped cubic LaAlO<sub>3</sub> perovskite: mBJ+ U study. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 417, 313 (2016).
- [8] J. Kübler, Physica B. 127, 257 (1984).
- [9] Blanco, M.A., Francisco, E., Luaña, V.: GIBBS: Comput. Phys. Commun. 158, 57 (2004).
- [10] Otero-de-la-Roza, A., Abbasi-Pérez, D., Luaña V.: Comput. Phys. Commun. 182, 2232 (2011).
- [11] Petit, A.T., Dulong, P.L.: Ann. Chim. Phys. 10, 395 (1819).
- [12] P.D. Dernier, J.P. Remeika, Mater. Res. Bull. 10 (1975) 187.
- [13] X.J.Tan, W.Liu, H.J.Liu, J.Shi, X.F.Tang, C.Uher: Phys. Rev. B. 85, 205 (2012).
- [14] Y.Pei, H.Wang, G.J.Snyder: Adv. Mater. 24, 6125 (2012).
- [15] G.K.Madsen, D.J.Singh, Boltztrap: Comput. Phys. Commun.175(1), 67–71 (2006).
- [16] R.B. Behrametal. Materials Science in Semiconductor Processing. 41, 297–303 (2016).
- [17] M. Hammou, F. Bendahma, M. Mana, S. Terkhi, N. Benderdouche, Z. Aziz and B. Bouhafs, *SPIN*. 4, 2050029 (2020).

## Conclusion générale

Dans le présent mémoire, nous avons effectué une série de calcul de premier principe basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et corrélation est traitée par les deux approximations GGA et TB-mBJ. Pour ce fait, nous sommes intéressés à étudier les alliages Heusler grâce à leurs intérêts technologiques et industriels.

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, thermodynamiques et thermoélectriques de l'alliage Heusler FeVSn. Les résultats obtenus sont résumés comme-suit :

Tout d'abord, nous avons commencé à calculer les propriétés structurales dans les trois configurations possibles à savoir le type (I), le type (II) et le type (III) prises dans la phase ferromagnétique. Les résultats obtenus montrent que ce matériau est stable dans la phase ferromagnétique de type (I), où tous les paramètres structuraux à l'équilibre sont déterminés dans cette phase (le paramètre du réseau ( $a$ ), le module de compressibilité ( $B$ ) et sa première dérivée par rapport à la pression ( $B'$ ). Ensuite, La deuxième étape de ce travail a été consacrée aux propriétés électroniques, magnétiques, thermodynamiques et thermoélectriques, où le bilan des résultats nous a permis de faire les conclusions suivantes:

- ❖ L'étude de la structure des bandes électroniques montre que le canal de spin minoritaire est métallique, alors que dans le spin majoritaire il y a un gap indirect  $W - X$  pour FeVSn autour du niveau de Fermi d'environ 0.83 eV. Cela confirme que notre matériau est un ferromagnétique demi-métallique (FDM) avec un demi-gap de 0,23 eV.
- ❖ le moment magnétique total  $M_{tot}$  de l'alliage FeVSn a une relation linéaire avec le nombre des électrons de valence ( $Z_{tot}$ ) obéissant à la règle de Slater – Pauling  $M_{tot} = 18 - Z_{tot}$ .
- ❖ Les propriétés thermodynamiques ont été étudiées à l'aide de l'approximation quasi-harmonique de Debey, approuvent la stabilité du FeVSn.
- ❖ Les valeurs du module de compressibilité ( $B$ ) obtenues en utilisant les propriétés structurales et thermodynamiques sont similaires.
- ❖ La capacité thermique à volume constant ( $C_v$ ) augmente rapidement avec la température et suit la loi de Debye ( $C_v \propto T^3$ ). A partir de  $T = 600$  K,  $C_v$  augmente

lentement avec une température approchant, atteignant la limite classique de Dulong-Petit, phénomène courant dans tous les solides.

- ❖ Le comportement de la température de Debye de FeVSn est semblable à celui du module de compressibilité B.
- ❖ L'augmentation de l'entropie est due à l'augmentation du mouvement vibrationnel des atomes avec la température conduisant à l'augmentation de l'énergie interne du système.
- ❖ Le coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  à 300 K et à la pression nulle est de  $8,65 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  pour FeVSn.
- ❖ Les propriétés thermoélectriques sont calculées dans l'intervalle de 50 à 1200 K.
  - Les valeurs négatives du coefficient de Seebeck confirmant la nature type n de ce matériau.
  - la conductivité électrique augmente avec la température, ceci est directement lié au comportement métallique de notre composé dans l'état de spin minoritaire (down).
  - L'augmentation de la conductivité thermique associée aux températures élevées est provoquée par la vibration des phonons.
  - Les valeurs maximales de ZT font du composé FeVSn un bon candidat pour les dispositifs de transport à basses températures.

Enfin, nous précisons que nos prédictions démontrent que FeVSn est un candidat potentiel pour les futures applications dans le domaine spintronique tel que : la magnéto-électronique, les générateurs, les transformateurs et les mémoires magnétiques (disques durs, etc.), ainsi le domaine thermoélectrique.