



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de L'Enseignement Supérieur 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



N° d'ordre : M2.../GPM/2022

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE **MASTER ACADEMIQUE**

Filière : Génie des procédés

Option : Génie des procédés des matériaux

Stabilité Structurale et Elastique d'un alliage de type HEUSLER

Présenté par :

1. GOUAICH ABDELKADER
2. TEMINA ABDELAZIZ

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

Présidente : SEFIR YAMINA	Grade : MCA	U - Mostaganem
Encadrante : BENDAHEMA FATIMA	Grade : MCA	U - Mostaganem
Examinatrice : MEHTOUGUI NABILA	Grade : MCA	U - Mostaganem

Année Universitaire :

2021 / 2022

Remerciements

En préambule à ce mémoire je remercie ALLAH qui m'aide et me donne la patience et le courage durant ces longues années d'étude.

*Je tiens à exprimer mes sincères gratitudees à Madame **SEFIR YAMINA***

Maitre de conférences à l'université de MOSTAGANEM d'avoir accepté de présider le jury, mes sincères gratitudees également à Mademoiselle

***MEHTOUGUI NABILA**, Maitre-assistant à l'université de Mostaganem de bien vouloir m'accorder de leur temps précieux pour évaluer mon travail. Je tiens*

*à remercier sincèrement Madame **BENDAHMA FATIMA**, Maitre de conférences de Classe A à l'université de Mostaganem qui, en tant que Directeur de mémoire, s'est toujours montrés à l'écoute et très disponible tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'il a bien voulu me consacrer et sans qui ce mémoire n'aurait jamais vu le jour. J'exprime*

mes remerciements au corps professoral et administratif de la Faculté des Sciences, et du laboratoire de recherche, et je souhaite exprimer mes gratitudees pour le Département de génie des procédés, pour la richesse et la qualité de leur enseignement et qui déploient de grands efforts pour assurer à leurs étudiants une formation actualisée.

Dédicaces

Du profond de mon cœur, je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chers.

A mes chers parents, que nulle dédicace ne puisse exprimer mes sincères sentiments, pour leur contribution, leur soutien, leur patience et leur sacrifice.

A mes chers frères qui sont une source de courage, d'amour et d'espoir pour moi. A mes chères sœurs qui sont très chères à mon cœur et qui m'ont toujours soutenu, avec qui j'ai partagé les joies et les difficultés durant ce Projet et toutes les années de mes études, et à qui je dois tout l'amour, qui sont mes exemples de persévérance, de courage et de générosité. À qui je suis reconnaissante pour leur soutien, et qui m'ont accordé tout l'amour et l'attention. A mon chère collègue, ABDELAZIZ, mes chères cousines, mes adorables tantes et oncles. A toutes mes chères amies et collègues.

'ÆK'

Dédicaces

Du profond de mon cœur, je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chers.

*A mes très chers parents, aucun hommage être à la hauteur de vos sacrifices,
de l'amour et de l'affection dont vous n'avez jamais cessé de m'entourer
toutes ou langue de ces années d'études. J'espère que vous trouvez dans ce
travaille un vrais témoignage de mon profond amour et éternelle
reconnaissance.*

A toute la famille.

*A mon binôme ABDELKADER et cher ami, à qui je souhaite bonne chance
pour son prochain projet.*

A toutes mes chers amis.

Pour tous les instants inoubliables que j'ai passés avec vous.

A tous ceux qui m'aiment.

A tous ceux que j'aime.

'AZIZ'

Résumé

Nous avons étudié le matériau ternaire HEUSLER en utilisant la méthode des ondes planes à potentiel complet linéarisé augmenté (FP-LAPW) basée sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code WIEN2k, pour déterminer la stabilité structurale et élastique d'un composé de type HEUSLER.

Le potentiel d'échange et de corrélation est traité par l'approximation de gradient généralisé (GGA).

Pour confirmer la stabilité de ce composé, les constantes élastiques (C_{ij}) sont calculées à l'aide de la méthode contrainte – déformation.

Les résultats obtenus montrent que le FeTiSn et CoTiSn est ferromagnétique métallique (FM), ductile et anisotrope.

Mots-clés : HEUSLER, ferromagnétique métallique (FM), approximation du gradient généralisé (GGA), propriété élastique.

Abstract

We studied the HEUSLER ternary material using the linearized full-potential augmented plane wave (FP-LAPW) method based on density functional theory (DFT) implemented in the WIEN2k code, to determine the structural and elastic stability of HEUSLER compound. The potential for exchange and correlation is handled by the generalized gradient approximation (GGA). To confirm the stability of this compound, the elastic constants (C_{ij}) are calculated using the stress–strain method. The obtained results show that FeTiSn and CoTiSn is metallic ferromagnetic (FM), ductile and anisotropic.

Keywords: HEUSLER, metallic ferromagnetic (FM), generalized gradient approximation (GGA), elastic property.

المخلص

لقد درسنا مادة HEUSLER الثلاثية باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة ذات الإمكانيات الكاملة الخطية (FP-LAPW) بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) المطبقة في كود WIEN2k، لتحديد الاستقرار الهيكلي والمرن لمركب يشبه HEUSLER. يتم التعامل مع إمكانية التبادل والارتباط من خلال تقريب التدرج المعمم (GGA). لتأكيد ثبات هذا المركب، تم حساب الثوابت المرنة (Cij) باستخدام طريقة الإجهاد والانفعال.

أظهرت النتائج المتحصل عليها أن FeTiSn و CoTiSn عبارة عن مغنطيسي حديدي معدني (FM)، مطيل ومتباين الخواص.

الكلمات المفتاحية: HEUSLER، المعدنية المغناطيسية (FM)، تقريب التدرج المعمم (GGA)، الخاصية المرنة.

SOMMAIRE

Remerciements.....	I
Dédicaces.....	II
Résumé.....	III
Sommaire.....	IV
Liste des figures.....	V
Liste des tableaux.....	VI
Introduction générale.....	1
Références.....	3

CHAPITRE I : Alliages HEUSLER

I. 1. Introduction.....	5
I. 2. Alliages HEUSLER.....	5
I. 3. Type des alliages HEUSLER	7
I.3. 1_ Alliages demi-HEUSLER (HALF-HEUSLER).....	7
I.3. 2_ Alliages HEUSLER complet (Full-HEUSLER).....	7
I.3. 3_ Alliages HEUSLER quaternaire (QUATERNER -HEUSLER).....	8
I. 4. Structure cristalline des alliages d'HEUSLER.....	9
I. 5. Procédés de synthèse des HEUSLER.....	11

I. 6. Magnétisme dans les alliages HEUSLER	12
I. 7. Applications des HEUSLER.....	14
I. 8. Conclusion	14
I. Références	15

CHAPITRE II : Méthodes de calcul

II.1 Introduction.....	18
II.2 Equation de Schrödinger.....	18
II.3 Approximation adiabatique de Born Oppenheimer.....	19
II.4 Théorie de la fonctionnelle de la densité.....	20
II .4-a- Modèle de Thomas-Fermi	20
II .4-b- Equations de Kohn-Sham.....	20
II.5 Approximation du gradient généralisé (GGA).....	22
II.6 Self consistance dans les calculs de la DFT	22
II.7 Méthode des ondes planes augmentées (APW).....	24
II.8 Amélioration de la méthode FP-LAPW.....	26
II .8 -a- Fenêtres d'énergies multiples	26

II .8 -b- Développement en orbital local.....	26
II.9 Code Wien2k.....	27
II.10 Détails des calculs.....	30
II.11 Conclusion.....	30
II. Référence	31

CHAPITRE III : Résultats et discussion

III.1 Introduction	33
III.2 Propriétés structurales	33
III.3 Propriétés électroniques	35
III.3.1 Structure des bandes.....	35
III.3.2 Densité d'états (DOS).....	36
III.4 Propriétés magnétiques	38
III.5 Propriétés élastiques	38
III.6 Conclusion.....	41
III. Références	42
Conclusion générale	43

Liste des figures

Figure N°	Titre de la figure	Page
I.1	Répartition des éléments composants les alliages HEUSLERS	6
I.2	Schémas représentatifs des mailles cubiques d'un alliage d'HEUSLER (Full-HEUSLER) et d'un demi-HEUSLER (HALF- HEUSLER)	8
I.3	Structure HEUSLER inverse CuHg ₂ Ti (a), structure quaternaire LiMgPdSn (b)	9
I.4	Structure cristallographique théorique des alliages Full-Heusler	9
I.5	Représentation schématique de la structure C1b du semi HEUSLER type XYZ	10
I.6	Représentation schématique de la structure prototype LiMgPdSb.	11
I.7	Schéma représentant le fonctionnement d'un SPARK Plasma SINTERING	12
I.8	Les composés de type X ₂ YZ de HEUSLER ont deux sous-réseaux magnétiques qui peuvent se coupler ferromagnétique ou antiferromagnétique.	13
II.1	L'organigramme du calcul self consistant de la Théorie de la Fonctionnelle de la densité	23
II.2	Répartition de la maille unitaire en sphères MT (1) et en région interstitielle (2)	24
II.3	l'organigramme des programmes du code Wien2K	29
III.1	Variation de l'énergie totale du composé FeTiSn en fonction du volume.	34
III.2	Variation de l'énergie totale du composé CoTiSn en fonction du volume.	35
III.3	Structure des bandes des composés FeTiSn et CoTiSn.	36
III.4	Densité totale et partielle des états des deux alliages FeTiSn et CoTiSn.	37

Liste des tableaux

Tableau N°	Titre du tableau	Page
I.1	Les différents possibilités d'occupations des sites dans la structure demi-HEUSLER C1b.	10
III.1	Le paramètre de réseau a (Å), le module de compressibilité B (GPa), sa première dérivée de pression B' , le volume V (bohr) ³ et l'énergie totale minimale E (Ry)	34
III.3	Moment magnétique total et partiel en (μB) du FeTiSn et CoTiSn	38
III.4	Les constantes élastiques calculées C_{ij} (GPa), module de compressibilité B (GPa), module de cisaillement G (GPa), coefficient de Poisson ν , facteur d'anisotropie A et module de Young E (GPa) du composé FeTiSn et CoTiSn	39

Introduction Générale

Avec les développements récents dans la physique de la matière condensée, beaucoup d'efforts ont été déployés pour une meilleure compréhension du comportement des matériaux. Comprendre la physique d'un matériau nécessite la connaissance fondamentale de sa structure, de sa stabilité de phases et de ses diverses propriétés structurales, électroniques, vibrationnelles et mécanique.

L'électronique a connu un développement immense pendant les trois dernières décennies, mais peu d'attention a été dédiée à l'incorporation de matériaux magnétiques dans les dispositifs électroniques intégrés. Toutefois, un nouveau champ en électronique, la spintronique, a largement attiré l'attention récemment. Le fondement étant la vérité de base qu'un électron a un spin en plus de sa charge. Dans le contexte de l'électronique de spin, les spins des électrons et pas uniquement leur charge électrique, sont contrôlés dans l'opération de transfert d'information dans les circuits. Les matériaux magnétiques et les semi-conducteurs se sont développés séparément pendant longtemps avec les matériaux magnétiques principalement utilisés pour le stockage de données comme dans les disques durs et les dispositifs à base de semi-conducteurs pour le traitement de ces données comme dans les processeurs. C'est un défi de taille d'intégrer les deux classes de matériaux pour le développement de dispositifs spintronique. Les dispositifs spintronique combinent les avantages des matériaux magnétiques et des semi-conducteurs pour être multilatéraux, rapides, et non volatiles.

Actuellement les progrès technologiques et industriels dans différents domaines dépendent fortement de l'avancement de la recherche dans le domaine des matériaux magnétiques (de nouvelles caractéristiques des matériaux doivent être prises en compte : la polarisation de spin, la bande de conduction, la symétrie des porteurs polarisés, le magnétisme des interfaces...). L'une des applications électroniques de spin est l'utilisation des semi-métaux. Une des principales propriétés de ces métaux est la « semi-métallicité », c'est-à-dire, les électrons de conditions qui sont 100% polarisés en spin en raison d'un écart au niveau de Fermi. Ce phénomène a simulé un grand intérêt dans le développement des matériaux qui possèdent cette propriété, une nouvelle classe a été prédite appelée les semi-métaux ferromagnétiques.

Une classe prometteuse parmi ces matériaux, sont les alliages HEUSLER et plus précisément celle des alliages HEUSLER ferromagnétique, cette classe est de type $XTiSn$, où $X = Fe$ et Co et Ti et Sn représente les éléments du groupe III, IV ou V de le tableau périodique [1-4].

Parmi les alliages HEUSLER de type $XTiSn$, nous avons le $FeTiSn$ et $CoTiSn$ qui sont proposés comme des ferromagnétiques métalliques (FM), et ont été étudié en détail expérimentalement et théoriquement [5]. Plus tard, les structures de bande ont été étudiés dans la série d'alliages de type $FeTiSn$ et $CoTiSn$.

Dans ce travail, deux voies exploratoires sont empruntées : une étude par simulation Wien2k, au sein de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), de la classe des alliages d'HEUSLER où nous proposons d'examiner les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et élastiques du l'alliage HEUSLER $FeTiSn$ et $CoTiSn$; et, en second lieux, une analyse par les méthodes de fouille des données (plus connue par le datamining), approche novatrice en science des matériaux. Il s'agit d'un processus d'extraction de connaissances valides et exploitables à partir de volumes de données pouvant être de tailles considérables.

Après cette introduction générale, ce manuscrit est organisé comme suit : le chapitre I présente des généralités sur les alliages d'HEUSLER et leurs propriétés. Le chapitre II donne une idée générale sur l'ensemble des outils numériques, notamment les méthodes basées sur la DFT et les techniques de datamining. Le chapitre III regroupe l'essentiel du travail à proprement dit. En l'occurrence, les principaux résultats des calculs ab-initio et les analyses élaborées par datamining à la fin, une conclusion récapitule l'essentiel des points abordés et liste les résultats les plus intéressants, tout en proposant des voies d'explorations futures.

Reference:

- [1] S. FUJII, M. OKADA, S. ISHIDA AND S. ASANO, J. PHYS. SOC. JPN 77 (2008) 74702.
- [2] H. Z. LUO, Z. Y. ZHU, G. D. LIU, S. F. XU, G.H. WU, H.Y. LIU, J.P. QU AND Y.X. LI, J. MAGN. MATER. 320 (2008) 421.
- [3] S. WURMEHL, H. C. KANDPAL, G. H. FECHER AND C. FELSER, J. PHYS. CONDENS. MATTER. 18 (2006) 6171.
- [4] H. Z. LUO, H. W. ZHANG, Z. Y. ZHU, L. MA, S. F. XU, G. H. WU, X. X. ZHU, C. B. JIANG AND H. B. XU, J. APPL. PHYS. 103 (2008) 083908.
- [5] S. ISHIDA, S. ASANO, J. ISHIDA, J. PHYS. SOC. JAP. 53 (1984) 2718.

CHAPITRE I :

"Alliages HEUSLER"

I. 1. Introduction

La spintronique est une nouvelle technologie qui met à profit le spin de l'électron et plus précisément, le phénomène de courant polarisé en spin. Les travaux fondateurs de la spintronique concerne la Magnétorésistance Tunnel (TMR pour Tunneling Magnétorésistance), découverte par JULLIERE en 1975 [1], l'injection de courant polarisé en spin d'un matériau ferromagnétique vers un métal non-magnétique, observé par Johnson et SILSBEE en 1985 [2], et notamment, la Magnétorésistance Géante (GMR pour Géant Magnéto résistance) découvert par Fert en 1988 [3] et Grunberg en 1989 [4].

Dans les matériaux ferromagnétiques comme le Fe ou le Co, les bandes des électrons up et des électrons down, sont dissymétriques, c'est-à-dire que la densité d'états électroniques pour les spins up et pour les spins down est différente. On parle alors de spins majoritaires et spins minoritaires. Cela implique qu'un électron traversant un matériau ferromagnétique aura une probabilité de diffusion différente selon son état de spin, se traduisant par une différence de résistivité électrique des spins up et des spins down. Ainsi, un courant électrique, passant à travers un matériau ferromagnétique, voit sa quantité d'électrons avec spin up et spin down modifiée : on dit que le courant est polarisé en spin. Cet effet est à la base des phénomènes de Magnétorésistance Géante (GMR) et de Magnétorésistance Tunnel (TMR).

I. 2. Alliages HEUSLER

Depuis la découverte de la semi-métallité ferromagnétique des alliages, ces derniers sont devenus un domaine d'intérêt de la recherche pour les applications en spintronique [5]. Le prototype des composés HEUSLER est l'alliage Cu_2MnAl été découvert par Friedrich HEUSLER en 1903 [6,7], il a le comportement ferromagnétique et une température de Curie élevée. En effet, leur particularité et leurs propriétés sont complètement différentes de ces éléments constitutifs. Cette classe de matériaux remarquable et ses équivalents, qui comprennent maintenant une vaste collection de plus de 1000 composés, sont connus comme composés ou **alliages HEUSLER**. Ils sont des matériaux semi-conducteurs ou métalliques ternaires avec un mélange **1:1:1** (également connu sous le nom « **HALF-HEUSLER** ») ou d'un mélange **2:1:1** connu sous le nom du « **Full-HEUSLER** » [8]. Le nombre infini de composés qui peut être préparé par la combinaison avec presque tous les éléments du tableau périodique est illustré dans la **Figure I.1**.

X₂YZ 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.1 : Répartition des éléments composants les alliages HEUSLERS.

Les dispositifs spintroniques combinent les avantages des matériaux magnétiques et des semi-conducteurs pour être multilatéraux, rapides, et non volatiles. Ces dernières décennies, les alliages HEUSLER ont reçu un grand intérêt qui s'explique par différentes propriétés qui sont bien adaptées pour des applications dans des dispositifs. L'une des propriétés qui a contribué à la multiplication des travaux sur ces alliages est le caractère semi-métallique prédit par GALANAKIS. Pour les alliages full HEUSLER.

I. 3. Types des alliages HEUSLER

Les alliages HEUSLER ternaires se divisent en deux grandes familles en fonction de leur composition chimique :

- Full-HEUSLER
- HALF-HEUSLER (semi HEUSLER)

I.3. 1_ Alliages demi-HEUSLER (HALF-HEUSLER)

Les alliages de cette famille ont une composition chimique de la forme XYZ (des composés ternaires), ils sont constitués de deux parties ; une partie covalente et une autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique [9,10]. Leurs structures cristallographiques est C1 avec le groupe d'espace cubique F-43m (groupe d'espace N° 216). La nomenclature dans la littérature ne varie pas par l'ordre alphabétique des éléments ou d'une façon aléatoire mais elle varie par leur degré de l'électronégativité. L'élément le plus électropositif est placé au début de la formule, il peut être un élément d'un groupe principal, un métal de transition ou un élément des terres rares. L'élément le plus électronégatif se trouve à la fin est considéré comme un élément d'un groupe principal de la seconde moitié de la classification périodique, par exemple le cas des LiAlSi, ZrNiSn, et LuAuSn [11-12].

I.3. 2_ Alliages HEUSLER complet (Full-HEUSLER)

Les alliages HEUSLER sont souvent connus sous le nom de full-HEUSLER qui est une classe de composés intermétalliques. Ils sont caractérisés par la formule chimique X₂YZ, où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément des groupes III à V dans le tableau périodique. Cela montre que le métal (X) existe en deux fois, placé au début de la formule (le plus électropositif), tandis que l'élément le plus électronégatif est placé à l'extrémité. Cependant, dans certains cas, Y est remplacé soit par un élément des terres rares, soit par un métal alcalino-terreux.

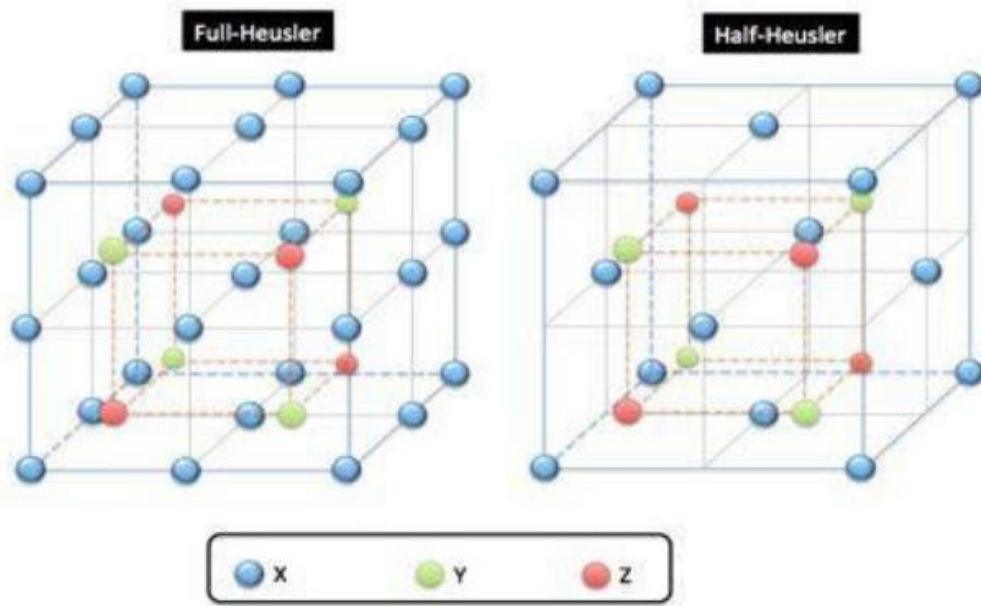


Figure I.2 : Schémas représentatifs des mailles cubiques d'un alliage d'HEUSLER (Full-HEUSLER) et d'un demi-HEUSLER (HALF- HEUSLER) [13]

I.3. 3_Alliages HEUSLER quaternaire (QUATERNER -HEUSLER)

Une autre famille existe pour les alliages d'HEUSLER, c'est le cas de composés HEUSLER quaternaires, où il y a quatre atomes de nature chimique différentes, avec deux éléments différents X et X'. Ils sont situés dans les positions 4a et 4d, respectivement, l'élément Y est placé sur les positions 4b tandis que l'élément Z sur les positions 4c. Cette structure présente le prototype LiMgPdSn et cristallisent dans le groupe d'espace cubique F-43m (groupe d'espace N° 216). Une illustration de la structure d'HEUSLER inverse et l'alliage d'HEUSLER quaternaire est donnée dans la **Figure I.3**.

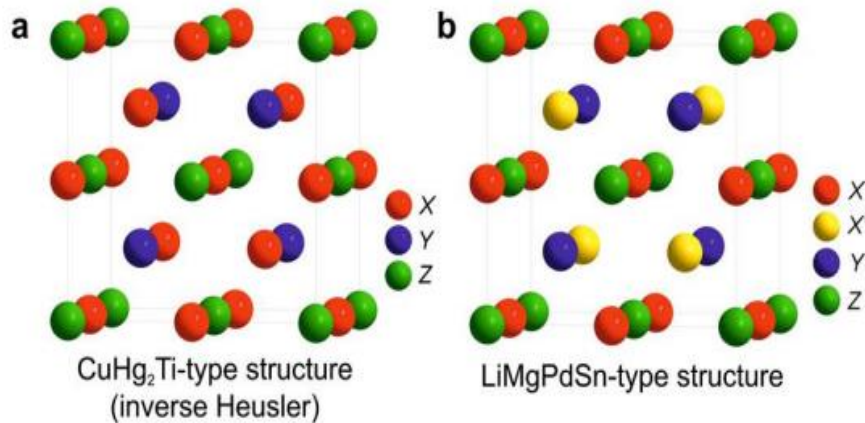


Figure I.3 : Structure HEUSLER inverse CuHg₂Ti (a), structure quaternaire LiMgPdSn (b)

I. 4. Structure cristalline des alliages d'HEUSLER

Les alliages Full-HEUSLER, représentent la deuxième famille d'alliages HEUSLER après les semi HEUSLER. Les composés contenant du Mn en particulier, sont des alliages Full-HEUSLER qui a attiré le plus d'attention. Ils sont tous ferromagnétiques avec hautes températures de Curie (au-dessus de 600°K).

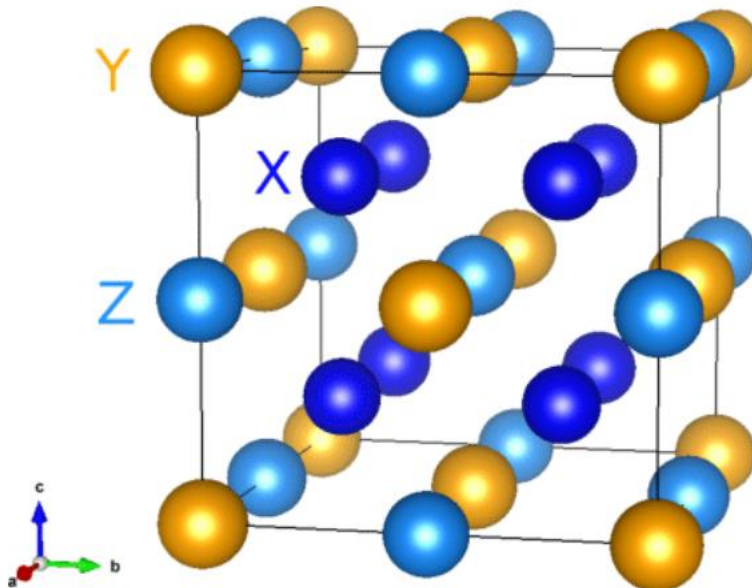


Figure I.4 : Structure cristallographique théorique des alliages Full-Heusler

Les alliages HEUSLER ou full-HEUSLER ont la formule générale X_2YZ qui cristallisent dans le groupe d'espace cubique $Fm-3m$ (groupe d'espace N°225) avec une forme de Cu_2MnAl (L21) comme prototype [14,15]. Les atomes X occupent la position 8c ($1/4, 1/4, 1/4$), les atomes Y et les atomes Z sont situés aux positions 4a (0, 0, 0) et 4b ($1/2, 1/2, 1/2$), respectivement.

Les alliages semi HEUSLER ternaires (XYZ) commandés avec la stœchiométrie 1: 1: 1 cristallisent dans la structure cubique avec le prototype $MgAgAs$ (C1b, groupe spatial $F-43m$ (216)) qui peut être dérivée d'une combinaison de la structure tétraédrique de type zinc blend et la structure de type rock salt (**figure I.6**). La structure semi HEUSLER est constituée de trois sous-réseaux interpénétrés occupés par les éléments X, Y et Z respectivement.

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

Tableau I.1 : Les différents possibilités d'occupations des sites dans la structure demi-HEUSLER C1b.

Ces éléments peuvent peupler des positions atomiques dans trois arrangements de types différents [16]: Type (I) X(0,0,0), Y($1/2, 1/2, 1/2$), Z($1/4, 1/4, 1/4$), Type (II) X($1/2, 1/2, 1/2$), Y($1/4, 1/4, 1/4$), Z(0,0,0) et Type (III) X($1/4, 1/4, 1/4$), Y(0,0,0), Z($1/2, 1/2, 1/2$). La position ($3/4, 3/4, 3/4$) est vacante pour ce type de composés.

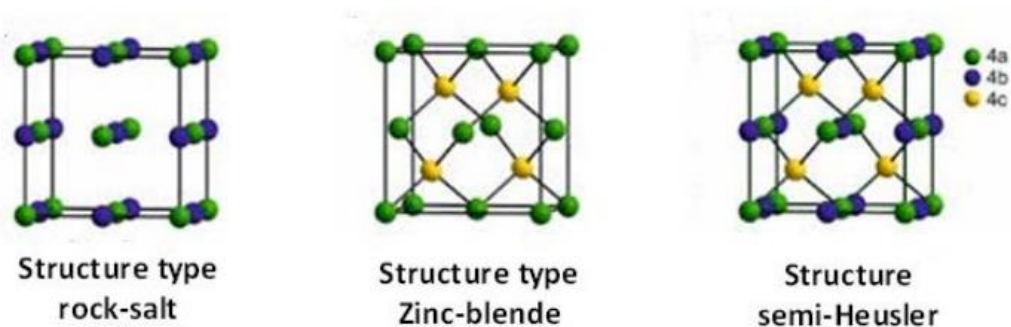


Figure I.5 : Représentation schématique de la structure C1b du semi HEUSLER type XYZ

Les semi HEUSLER quaternaires de formule chimique $XX'YZ$ cristallisent dans la structure prototype du LiMgPdSb [17] de groupe spatial $F-43m$ (**figure I.7**). Au sein de la structure cubique, les éléments X, X', Y et Z peuvent être arrangés selon trois différents types : Type (I) $X(0,0,0)$, $X'(1/4,1/4,1/4)$, $Y(1/2,1/2,1/2)$, $Z(3/4,3/4,3/4)$, Type (II) $X(1/2,1/2,1/2)$, $X'(0,0,0)$, $Y(1/4,1/4,1/4)$, $Z(3/4,3/4,3/4)$ et Type (III) $X(0,0,0)$, $X'(1/2,1/2,1/2)$, $Y(1/4,1/4,1/4)$, $Z(3/4,3/4,3/4)$.

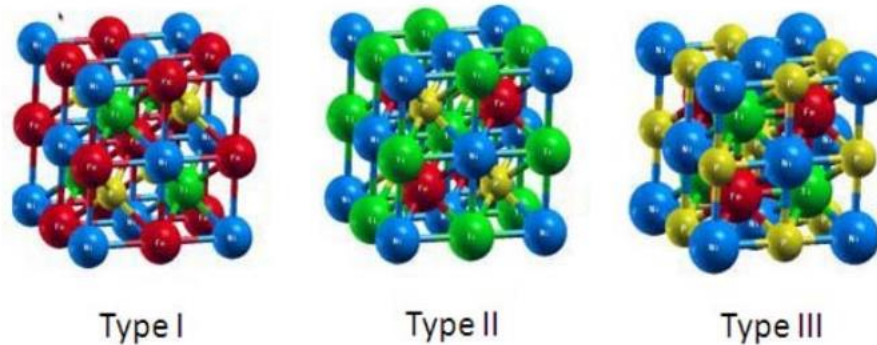


Figure I.6 : Représentation schématique de la structure prototype XYZ.

I. 5. Procédés de synthèse des HEUSLER

Les méthodes de synthèse des composés HEUSLERS sont diverses et variées. La méthode la plus utilisée reste le SPS [18] « Spark Plasma Sintering » ou littéralement « frittage plasma par étincelage ». Cette méthode consiste à faire passer un courant continu pulsé très intense à travers une poudre contenant les éléments en question afin d'utiliser la dissipation thermique due à l'effet Joule pour chauffer très rapidement la poudre. Dans la pratique, les poudres ou éventuellement les nano-poudres sont enfermées dans un container de forme cylindrique, généralement en graphite. Deux pistons permettent d'appliquer simultanément une forte pression (**Figure I.8**).

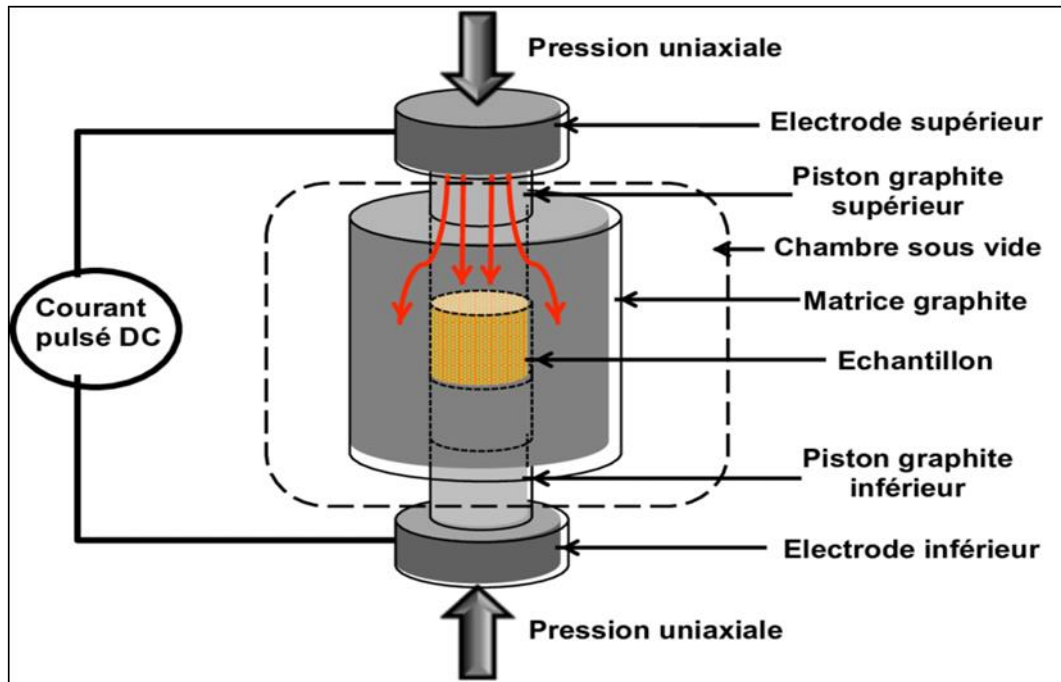


Figure I.7 : Schéma représentant le fonctionnement d'un SPARK Plasma SINTERING

Cette méthode permet de fritter très rapidement les matériaux sans pour autant faire grossir significativement la taille de grain. On peut ainsi conserver une microstructure ou une nanostructure souhaitée après le frittage. Le terme plasma dans la dénomination de la méthode provient du fait que l'on suppose qu'il se forme un plasma à la surface des grains pendant le frittage [19].

I. 6. Magnétisme dans les alliages HEUSLER

En 1903, Fritz HEUSLER trouva ferromagnétique, ce qui a attiré la communauté scientifique pour le bénéfice de ses alliages "alliages de HEUSLER". Cependant, il a fallu trois décennies jusqu'à ce que la structure cristalline ait été déterminée comme structure cubique à face centrées [20]. Malheureusement, ils sont tombés dans l'oubli dans les décennies suivantes, et seulement peu de rapports sur la synthèse de nouveaux composés HEUSLER ont été édités dans les années 70 [21,22]. Il a fallu attendre la prédiction du ferromagnétisme semi-métallique dans le composé $MnNiSb$ par de Groot [23] et dans le composé Co_2MnSn par KÜBLER [24] en 1983, pour que les matériaux HEUSLER retrouvent un intérêt scientifique.

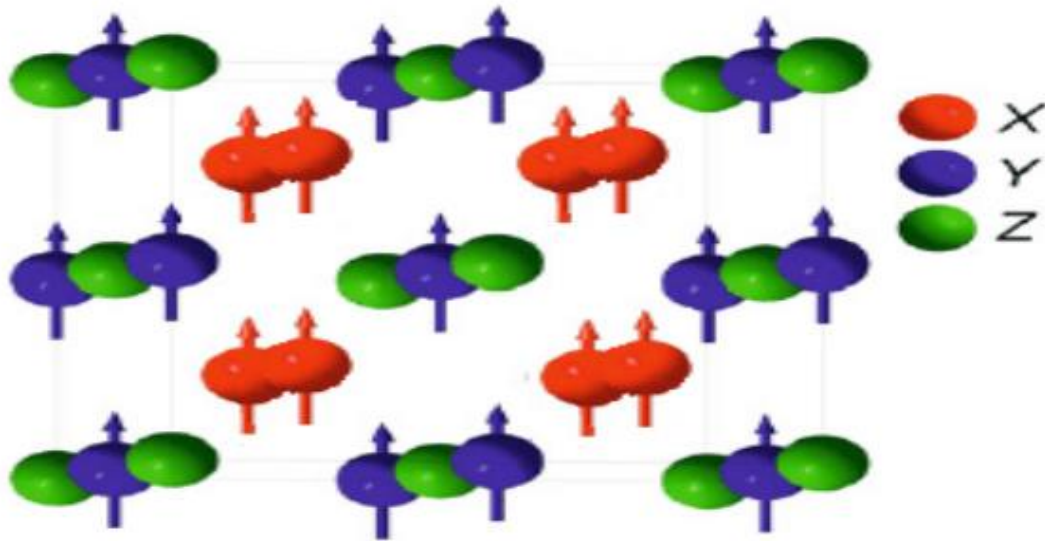


Figure I.8 : Les composés de type X_2YZ de HEUSLER ont deux sous-réseaux magnétiques qui peuvent se coupler ferromagnétique ou antiferromagnétique.

Dans les composés HEUSLER X_2YZ la situation est complètement différente à cause des deux atomes X qui occupent les sites tétraédriques, ce qui permet une interaction magnétique entre les atomes X et la formation d'un second sous-réseau magnétique plus délocalisé. En raison de ces deux sous-réseaux magnétiques différents, les composés HEUSLER X_2YZ peuvent montrer toutes sortes de phénomènes magnétiques, aujourd'hui plusieurs types sont connus tel que le ferromagnétisme, le ferrimagnétisme et le ferromagnétisme semi-métallique.

I. 7. Applications des HEUSLER

Les matériaux HEUSLER ferromagnétiques peuvent être utilisés dans des différents domaines tel que :

- L'effet magnéto résistif géant (GMR) utilisé dans les têtes de lecture des disques durs actuellement est la première application de la magnéto-électronique et spintronique [25].
- Magnéto-résistance Tunnel [26].
- Systèmes logiques à base d'ondes de spin et de filtres à spin [27].

I. 8. Conclusion

Nous avons présenté dans ce premier chapitre des généralités sur l'alliage de type HEUSLER du point de vue de leurs structures cristallines, leurs classifications et leurs propriétés d'usage, Nous avons aussi rapporté les notions de base sur les différents types de magnétisme.

Vue de les propriété intéressante discuté dans ce chapitre, nous allons étudier dans le chapitre suivant les différentes techniques de modélisation numérique qui est basé sur la simulation et en utilisant le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT et la méthode des ondes planes augmentées (APW).

I. Référence :

- [1] M. JULLIERE, PHYS. LETT. 54A, 225 (1975).
- [2] MARK JOHNSON AND R. H. SILSBEE, PHYS. REV. B 37, 5312 (1988).
- [3] M. N. BAIBICH, J. M. BROTO, A. FERT, F. NGUYEN VAN DAU, F. PETROFF, P. ETIENNE, G. CREUZET, A. FRIEDERICH, AND J. CHAZELAS. PHYS. REV. LETT., 61, 2472, (1988).
- [4] G. BINASCH, P. GRUNBERG, F. SAURENBACH, AND W. ZINN. PHYS. REV. B, 39, 4828 (1989).
- [6] K. YOSIDA, "MAGNETIC PROPERTIES OF CU-MN ALLOYS," PHYS. REV., VOL. 106, NO. 5, 893 (1957).
- [7] F. HEUSLER, W. STARCK, E. HAUPT, VERH DPG 5, 220 (1903).
- [8] F. HEUSLER, VERH DPG 5, 219 (1903).
- [9] C. FELSER, G.H. FECHER, B. BALKE, ANGEW CHEM INT ED 46, 668 (2007).
- [10] W. WUNDERLICH, X. MOTOYAMA. MATER. RE. SOC. SYMP. PROC, 1129, 1128-U01-10 (2009).
- [11] H. ZENASNI, « ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES MAGNETIQUE ELECTRONIQUES ET STRUCTURALES DES ALLIAGES HEUSLER », UNIVERSITE DE TLEMCEN, THESE DE DOCTORAT (2013).
- [12] H. TUZCUOGLU, « CORRELATION ENTRE LES PROPRIETES STRUCTURALES ET MAGNETIQUES DES COUCHES MINCES ET NANOSTRUCTURES DE CO₂FEAL », LABORATOIRE DES SCIENCES DES PROCESSES ET DES MATERIAUX (LSPM) UNIVERSITE PARIS NORD-PARIS XIII, THESE DE DOCTORAT (2014).
- [13] H.U. SCHUSTER, H.W. HINTERKEUSER, W. SCHÄFER, G. WILL, Z NATURFORSCH B 31, 1540 (1976).
- [14] H. HOHL, A.P. RAMIREZ, C. GOLDMANN, G. ERNST, B. WOLFING, E. BUCHER, J PHYS CONDENSE MATTER 11, 1697(1999).
- [15] G. O, HERNANDEZ, THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE TOULOUSE, (2013).
- [16] G.XU DAI, G.H. LIU, C. FECHER, Y. FELSER, H. LI, LIU, J. APPL. PHYS. 105 07E901 (2009).
- [17] O.GUILLON, J.G.JULIAN, B.DARGATZ, T.KESSEL, G.SCHIERNING, J.R.ATHEL, AND M.HERRMANN. ADVANCED ENGINEERING MATERIELS, 16(7), 830- 849(2014).

- [18] L. ANDREA, MODELISATION DU TRANSPORT THERMIQUE DANS DES MATERIAUX THERMOELECTRIQUES, THESE DE DOCTORAT EN PHYSIQUE PARIS VI. (2016).
- [19] Y. NISHINO, M. KATO, S. ASANO, K. SODA, M. HAYASAKI, U. MIZUTANI, PHYSREVLETT 79, 1909(1997).
- [20] M. MORCRETTEA, D. LARCHERA, J.M. TARASCONA, K. EDSTROMB, J.T. VAUGHEYC, M.M.THACKERAYC, ELECTROCHIM ACTA, 52, 5339(2007).
- [21] P.J WEBSTER, J PHYS. CHEM. SOLIDS, 32, 1221(1971).
- [22] S. BROOKS, J.M WILLIAMS, PHYS. STAT. SOL., A 32, 413(1975).
- [23] R.A. DE GROOT, F.M. MUELLER, P.G. VAN ENGEN, K.H.J. BUSCHOW, PHYS. REV. LETT., 50 (1983).
- [24] J. KÜBLER, A.R. WILLIAMS, C.B. SOMMERS, PHYS. REV., B 28, 1745(1983).
- [25] M.JULLIERE, PHYS. LETT, A54, PP. 225–226 (1975).
- [26] R.PANDEY, J.E.JAFFE AND A.B KUNZ, PHYS. REV, B43, PP. 9228–9237 (1991).
- [27] B.HÜLSEN, M.SCHEFFLER, P.KRATZER, PHYS. REV, B79, PP. 094407(1-9) (2009).

CHAPITRE II :

"Méthodes de calcul"

II. 1. Introduction

La DFT est une des méthodes quantiques la plus utilisée dans les domaines de la physique du solide et la chimie quantique, employée dans la détermination des grandeurs physiques d'un système.

De nombreuses méthodes de calculs de structure électroniques. On distingue deux grandes catégories : les méthodes utilisant des paramètres expérimentaux dites semi empiriques et les méthodes de premiers principes ou ab initio, basées sur la résolution d'équation de Schrödinger. La résolution de l'équation de Schrödinger poly-électronique étant très complexe, sa simplification en un système d'équations mono-électroniques est plus aisée à résoudre numériquement, notamment grâce à quelques approximations.

Dans ce premier chapitre, les principales méthodes de résolution de ces équations seront brièvement exposées.

II. 2. Equation de Schrödinger

Afin d'étudier les propriétés d'un matériau solide composé d'un grand nombre de noyaux et d'électrons (M : noyaux et N : électrons) en interaction, l'équation de Schrödinger mentionnée ci-dessous devrait être résolue [1].

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

Dans cette équation, E est l'énergie totale du système, H est l'Hamiltonien et Ψ est la fonction d'onde.

L'Hamiltonien total du système contient plusieurs termes : les énergies cinétiques des électrons T_e et des noyaux T_n et les énergies potentielles représentant les interactions coulombiennes répulsives entre les électrons V_{ee} , entre les noyaux et attractives entre les noyaux V_{nn} et attractives entre les électrons et les noyaux V_{en} comme le montre l'équation :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad (\text{II. 2})$$

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

II. 3. Approximation adiabatique de Born-Oppenheimer

L'équation (2) peut ensuite être simplifiée grâce à l'approximation de Born-Oppenheimer (BO) qui découple le mouvement des électrons et des noyaux [2] :

$$\psi \approx \psi_{BO} = \psi_{elec} \times \psi_{noyaux} \quad (II. 3)$$

En effet, la masse des électrons étant bien plus faibles que celle des protons, on peut considérer qu'ils se réorganisent instantanément pour une position des noyaux donnée. Ainsi, pour les deux termes de l'équation (2) ne dépendant que des noyaux, T_n peut être négligé et V_{nn} est constant.

On peut alors résoudre l'équation de Schrödinger pour cette position des noyaux. Les hamiltoniens électronique et nucléaire ainsi obtenus s'écrivent :

$$H_{\text{électro}} = T_e + V_{ee} + V_{ne} \quad (II. 4)$$

$$H_{\text{noyaux}} = T_n + V_{nn} \approx V_{nn} \quad (II. 5)$$

La première simplification qui permet de voir le solide comme un ensemble d'électrons en interaction baignant dans le potentiel d'un ensemble de noyaux considérés comme statiques est l'approximation de **Born-Oppenheimer**.

II .4. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Le concept fondamental de la DFT est que l'énergie d'un système électronique peut être exprimée en fonction de sa densité. C'est en fait une idée ancienne datant principalement des travaux de Thomas [3], et Fermi en 1927[4]. Notons cependant que la DFT a été réellement établie avec l'apparition des théorèmes fondamentaux exacts d'HOHENBERG et KOHN en 1964[5] qui reliant l'énergie de l'état fondamental es sa densité de façon unique et ensuite étendus par KOHN et SHAM [6, 7].

II .4-a- Modèle de Thomas-Fermi

Thomas et Fermi ont indépendamment démontré dans les années vingt que l'on pouvait utiliser la densité électronique $\rho(\vec{r})$ comme variable centrale pour résoudre l'équation de **Schrödinger** [8,9]. La théorie de Thomas et Fermi est une véritable théorie de la fonctionnelle de la densité. En ce sens que toutes ces contributions à l'énergie électronique totale (cinétique aussi bien qu'électrostatique) sont exprimées en termes de la densité électronique, elle subdivise le système inhomogène en petite boîtes en volumes élémentaires d^3r , dans lesquelles les électrons ont un comportement d'un gaz homogène de densité constante.

L'énergie de l'état fondamental E^{TF} s'obtient en minimisant ρ suivant [10] :

$$E^{TF}(\rho) = A_0 \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{r})^{5/3} d\vec{r} + \int_{\mathbb{R}^3} V(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + 1/2 \int \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') / |\vec{r} - \vec{r}'| d\vec{r} d\vec{r}' \quad (II. 6)$$

II .4-b- Equations de KOHN-SHAM

KOHN et SHAM [11] 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 :

$$\rho(r) = \sum_i |\Psi(r)|^2 \quad (II. 7)$$

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

La fonctionnelle de KOHN-SHAM s'écrit :

$$E_{KS}(n) = T_{KS} + E_H(n) + E_{xc}(n) + \int V_{ext}(r)n(r)dr \quad (II. 8)$$

Avec T_{KS} l'énergie cinétique.

$$T_{KS} = \sum_{i=1}^N \left\langle \Psi_i \left| \frac{\nabla_i^2}{2} \right| \Psi_i \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \Psi_i(r)|^2 \quad (II. 9)$$

E_H l'énergie d'Hartree :

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r - r'|} dr d\vec{r} \quad (II. 10)$$

Et E_{xc} l'énergie d'échange-corrélation.

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

$$H_{KS}\Psi_i(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff} \right] \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (\text{II. 11})$$

Avec :

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \quad (\text{II. 12})$$

Et :

$$V_H(r) = \frac{\delta E_H[n]}{\delta n} = \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr' \quad (\text{II. 13})$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\rho(r)} \quad (\text{II. 14})$$

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

$$E_{xc}[n(r)] = \{V_{ee}[n(r)] - E_H[n(r)]\} + \{T[n(r)] - T_s[n(r)]\} \quad (\text{II. 15})$$

$E_{xc}[n(r)]$ 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. 5. Approximation du gradient généralisé (GGA)

Dans le cadre de la GGA [12], 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 :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3\vec{r} \quad (\text{II. 16})$$

$\varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|]$: 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 que la LDA. Toutefois, les largeurs de bandes pour les isolants et les semi-conducteurs restent trop faibles.

II .6. Self consistence dans les calculs de la DFT

La nouvelle densité de charge est construite avec les vecteurs propres de l'équation séculaire en utilisant la densité de charge totale qui peut être obtenue par une sommation sur toutes les orbitales occupées : Si les calculs ne concordent pas, on mélange les deux densités de charge ρ_{out} et ρ_{in} de la manière suivante :

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho_{in}^i + \alpha\rho_{out}^i \quad (\text{II.17})$$

Avec :

i : représente $i^{\text{ème}}$ itération.

α : est un paramètre de mélange (mixage).

Cette procédure reste en calcul jusqu'à la convergence. On peut lui schématiser par le diagramme suivant :

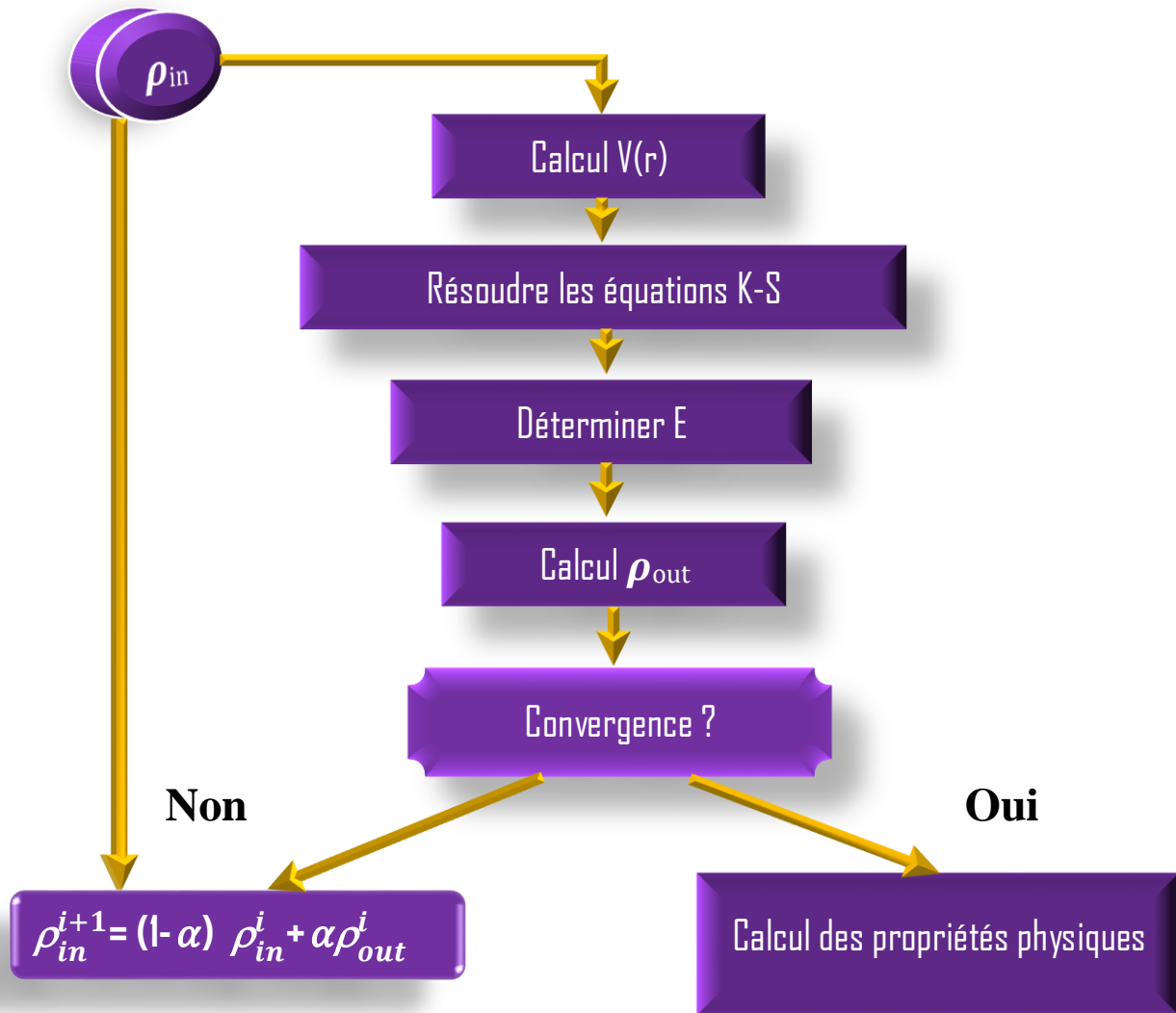


Figure II. 1: L’organigramme du calcul self consistant de la Théorie de la Fonctionnelle de la densité.

II. 7. Méthode des ondes planes augmentées (APW)

Slater considère que l’espace est divisé en deux types de régions : région de cœur et région interstitielle, La région près du noyau a un potentiel et une fonction d’onde similaire à ceux d’un atome isolé (alors, le potentiel varie fortement). Cette région est limitée par une sphère atomique (S) de rayon r_0 et le potentiel possède la symétrie sphérique.

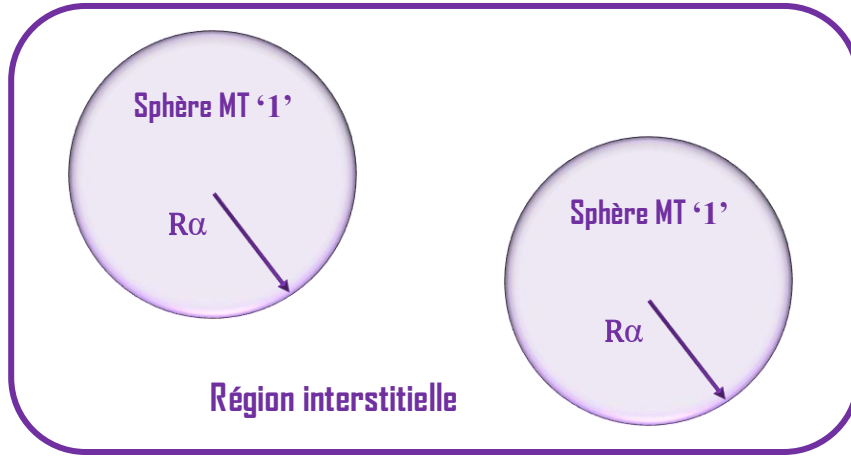


Figure II.2 : Répartition de la maille unitaire en sphères MT (1) et en région interstitielle (2).

Dans la région interstitielle les fonctions d’ondes sont planes et le potentiel est constant. Donc la fonction d’onde s’écrit sous la forme :

$$\Phi(\vec{r}) = \begin{cases} \varphi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}} & r > R\alpha \\ \varphi_s(\vec{r}) = \sum_{lm} A_{lm} U_l^\alpha(r, E_l) Y_{lm}(r) & r < R\alpha \end{cases} \quad (\text{II.18})$$

$\Phi(\vec{r})$: La fonction d’onde.

Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.

$U_l^\alpha(r, E_l)$: La fonction radiale.

$Y_{lm}(r)$: L’harmonique sphérique.

$C_{\vec{G}}, A_{lm}$: Les coefficients du développement en ondes planes et en harmonique sphérique.

\vec{k} : Le vecteur d’onde dans la première zone irréductible de Brillouin (ZB).

\vec{G} : Le vecteur de réseau réciproque et \vec{r} : Les positions à l’intérieur des sphères α

U_l^α La solution régulière de l’équation de Schrödinger pour la partie radiale donnée par :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right] r U_l(r) = 0 \quad (\text{II.19})$$

$V(r)$: Représente le potentiel Muffin-Tin, c'est la composante sphérique du potentiel dans la sphère et E_l est l'énergie de linéarisation.

Les fonctions radiales définies par cette équation sont orthogonales à tout état propre du cœur, mais cette orthogonalité disparaît en limite de sphère [13] comme le montre l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_1 - E_2) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 r U_1}{d^2 r} - U_1 \frac{d^2 r U_2}{d^2 r} \quad (II.20)$$

U_1, U_2 : sont les solutions radiales pour ces énergies E_1 et E_2 respectivement.

Le recouvrement étant construit en utilisant l'équation (II.20) et en l'intégrant par parties. Slater justifie le choix particulier de ces fonctions en notant que les ondes planes sont des solutions de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel est constant, tandis que les fonctions radiales sont des solutions dans le cas d'un potentiel sphérique, lorsque E_1 est une valeur propre. Cette approximation est très bonne pour les matériaux à structure cubique à faces centrées, et de moins en moins bonne lorsque la symétrie du matériau diminue.

L'origine est prise au centre de la sphère, les coefficients A_{lm} sont déterminés une fois donnés les coefficients C_G des ondes planes et les paramètres d'énergie E_1 , ces deux derniers étant des coefficients variationnels dans la méthode APW. On impose la continuité de la fonction d'onde à la limite de la sphère Muffin-Tin. Pour ce faire on développe l'onde plane en fonction des fonctions de Bessel sphériques, et on obtient :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\sqrt{\Omega} U_l R_\alpha} \sum_G C_G j_l(|k + g| R_\alpha) Y_{lm}^*(k + g) \quad (II.21)$$

j_l : La fonction de Bessel d'ordre l .

C_G : Sont les coefficients des ondes planes existantes dans la région interstitielle.

II .8. Amélioration de la méthode FP-LAPW

L'énergie de linéarisation est d'une grande importance dans la méthode (FP-LAPW). Puisque, au voisinage de E_l , on peut calculer l'énergie de bande à une précision très acceptable.

Cependant, dans les états semi-cœur, il est utile d'utiliser l'un des deux moyens : l'usage de fenêtres d'énergies multiples, ou le développement en orbitales locales.

II .8 -a- Fenêtres d'énergies multiples

La technique la plus utilisée pour traiter le problème du semi-cœur est celle qui consiste à diviser le spectre énergétique en fenêtres dont chacune correspond à une énergie E_l [14].

Dans ce traitement par le moyen de fenêtres, une séparation est faite entre l'état de valence et celui de semi-cœur où un ensemble de E_l est choisi pour chaque fenêtre pour traiter les états correspondants. Ceci revient à effectuer deux calculs par la méthode FP-LAPW, indépendants, mais toujours avec le même potentiel

La méthode FP-LAPW est basée sur le fait que les fonctions $U_l(r)$ et $U_l(r)$ sont orthogonales à n'importe quel état propre du cœur et, en particulier, à ceux situés à la surface de la sphère. Cependant, les états de semi-cœur satisfont souvent à cette condition, sauf s'il y a la présence de bandes « fantômes » entre l'état de semi-cœur et celui de valence.

II .8 -b- Développement en orbital local

Dans cette technique, on traite tous les états énergétiques avec une seule fenêtre d'énergie. TEKEDA [15], PERTU [16], SMRKA [17], Evans [18] et Singh [19] proposent une combinaison linéaire de deux fonctions radiales. Les dérivés de ces fonctions par rapport à l'énergie sont égaux, mais les énergies de linéarisation correspondantes sont différentes. La fonction propre à la forme suivante :

$$\phi_{lm} = [A_{lm}U_l(r, E_{1,l}) + B_{lm}U_l(r, E_{1,l}) + C_{lm}U_l(r, E_{2,l})]Y_{lm}(r) \quad (\text{II.22})$$

Où C_{lm} : sont ses coefficients possédant la même nature de coefficients A_{lm} et B_{lm} .

II .9. Code Wien 2K

Le code WIEN2k basé sur la méthode FP-LAPW est un programme de calcul de la structure électronique des solides. Il a été développé par Peter BLAHA et Karlheinz Schwartz De l'institut de Chimie des matériaux de l'université Technique de Vienne (Autriche) [20]. Ce code a permis de traiter avec succès les systèmes supraconducteurs à haute température, les minéraux, les surfaces des métaux de transition, les oxydes non ferromagnétiques, les molécules ainsi que le gradient du champ électrique [21-22]. Les différents programmes indépendants que comprend le code WIEN2K sont liés par le C-SHELL SCRIPT. Ils peuvent être exécutés en

utilisant soit une architecture séquentielle ou parallèle. La procédure de calcul passe par trois étapes :

1. L'initialisation : elle consiste à construire la configuration spatiale (géométrie), les opérations de symétrie, les densités de départ, le nombre de points spéciaux nécessaires à l'intégration dans la zone irréductible de Brillouin...etc. Toutes ces opérations sont effectuées grâce à une série de programmes auxiliaires qui sont :

NN : C'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, ce qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère MT.

LSTART : il permet de générer les densités atomiques ; il détermine comment les différentes orbitales atomiques sont traitées dans le calcul de la structure de bande.

SYMMETRY : il permet de générer les opérations de symétrie du groupe spatial et de déterminer le groupe ponctuel des sites atomiques individuels.

KGEN : il génère le nombre de points k dans la zone de Brillouin.

DSART : il génère une densité de départ pour le cycle auto-cohérent (le cycle SCF) par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

2. Calcul auto-cohérent (ou self-consistant) : les énergies et la densité électronique de l'état fondamental sont calculées selon un critère de convergence (énergie, densité de charge, force). Les sous programmes utilisés sont :

LAPW0 : Génère le potentiel à partir de la densité.

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

LAPW2 : Calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE : Calcule les états du cœur et les densités.

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

3. Détermination des propriétés : une fois le calcul auto-cohérent achevé, les propriétés de l'état fondamental (densité de charges, structure de bandes, propriétés optiques... etc.) sont alors déterminées.

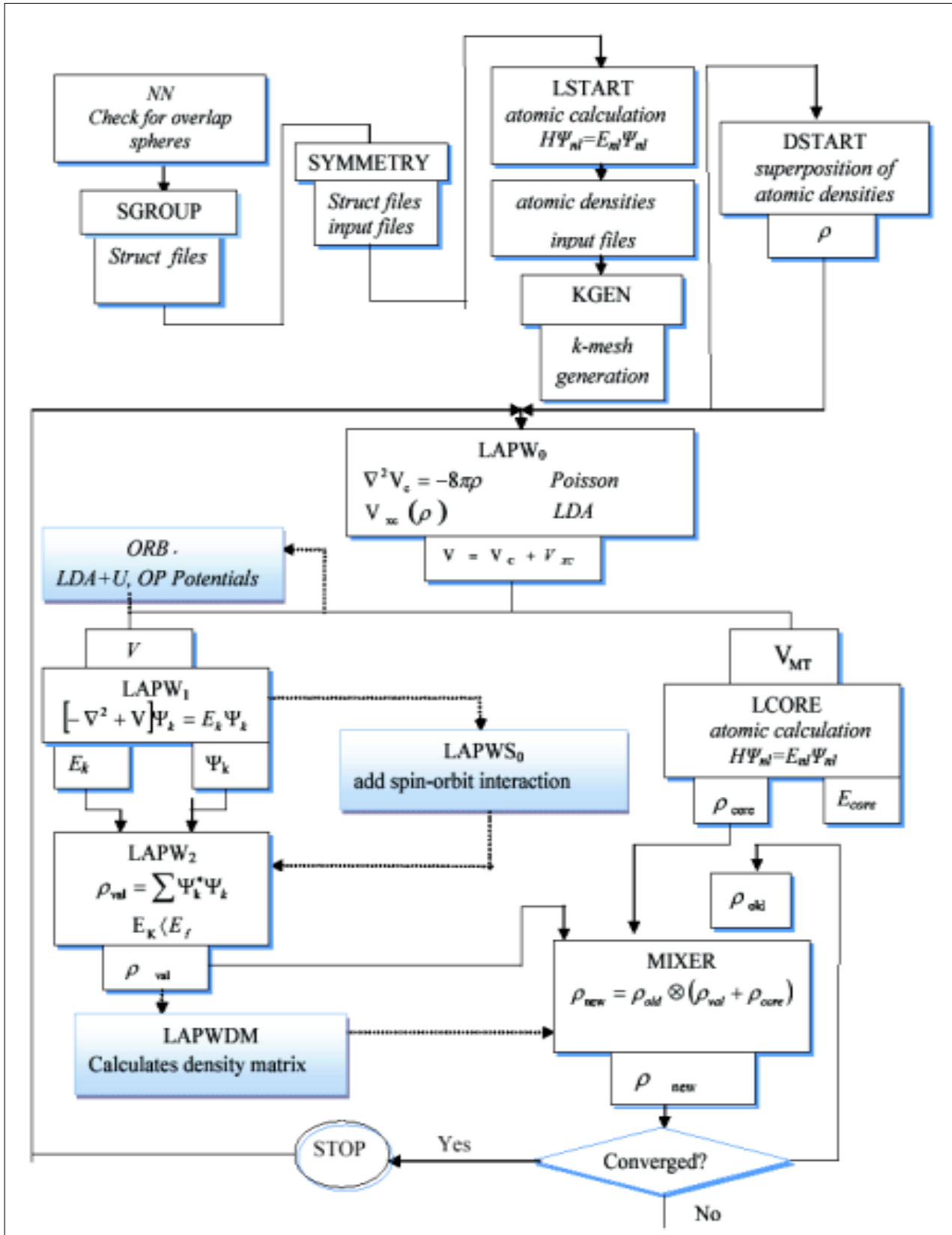


Figure II. 3 : l'organigramme des programmes du code Wien2K

II .11. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la méthodologie qui nous servira tout au long de ce travail. Il s'agit d'une méthode de calcul de structure électronique axée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Cette méthode nécessite un certain nombre d'approximations pour la résolution.

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) associée à l'approximation du gradient généralisé (GGA) sera utilisée pour étudier les propriétés structurales et électroniques. Sa mise en œuvre est faite à l'aide du code de calcul WIEN2K

Vue de les méthodes discuté dans ce chapitre, dans le chapitre suivant, nous verrons les résultats qui ont été obtenus.

II. Référence:

- [1] E. SCHRÖDINGER, AN UNDULATORY THEORY OF THE MECHANICS OF ATOMS AND MOLECULES, PHYS. REV., 28, 1049 (1926).
- [2] M. BORN, J. R. OPPENHEIMER, ANN. PHYSIK, 84, 457 (1927).
- [3] L. H. THOMAS, THE CALCULATION OF ATOMIC FIELD, PROC. CAMB. PHIL. SOC. 23, 542 (1927).
- [4] E. FERMI, Z. PHYSIK, 48, 73 (1928).
- [5] P. HOHENBERG, W. KOHN, INHOMOGENOUS ELECTRON GAS, PHYS. REV., B864, 136(1964).
- [6] P. HOHENBERG ET W. KOHN, PHYS. REV. 1, 36, B 864 (1964).
- [7] W. KOHN ET L.J SHAM, PHYS. REV. 140, A1113 (1965).
- [8] L. H. THOMAS, PRO. COMBRIDGE PHILOS.SOC. 23, 542 (1927).
- [9] E. FERMI, Z. PHYS. 48, 73 (1928).
- [10] C. CHAUVIN, THESE DE DOCTORAT, UNIVERSITE DE GRENOBLE (2005).
- [11] KOHN W. AND L.J. SHAM, SELF-CONSISTENT EQUATIONS INCLUDING EXCHANGE AND CORRELATION EFFECTS. PHYSICAL REVIEW, 1965.140, (4A): P. A1133-A1138.
- [12] PERDEW, J.P. AND A. ZUNGER, SELF-INTERACTION CORRECTION TO DENSITY-FUNCTIONAL APPROXIMATIONS FOR MANY-ELECTRON SYSTEM. PHYSICAL REVIEW B, 1981.23 (10): P. 5048-5079.
- [13] O.K. ANDERSEN, PHYS. REV. B 12, 3060 (1975).
- [14] L. SMRCKA, CZECH. J. PHYS. B 34, 694 (1984).
- [15] T. TAKEDA AND J. KUBLER, J. PHYS. F 5, 661 (1979)
- [16] J. PETRU AND L. SMRCKA, CZECH. J. PHYS. B 35, 62 (1985).
- [17] L. SMRCKA, CZECH. J. PHYS. B 34, 694 (1984).
- [18] G.R. EVANS, M.I. DRBY, J. PHYS. F 14, 1671(1987).
- [19] D.J. SINGH, PHYS. REV. B 43, 6388 (1991).
- [20] B. KOHLER, P. RUGGERONE, S. WILKE, AND M. SCHEFFLER, PHYS. REV. LETT. 74, 1387(1995).

[21] K., C. SCHWARZ, AMBROSCH-DRAXL, AND P. BLAHA, CHARGE DISTRIBUTION AND ELECTRICFIELD GRADIENTS IN YBA2CU3O7-X. PHYSICAL REVIEW B, 42(4) 2051-2061 (1990).

[22] X.G. WANG, ET AL., THE HEMATITE (A- FE2O3) (0001) SURFACE: EVIDENCE FOR DOMAINS OF DISTINCT CHEMISTRY. PHYSICAL REVIEW LETTERS, 81(5) 1038-1041(1998).

CHAPITRE III :

"Résultats et discussion"

III. 1. Introduction

Au cours de ce chapitre nous allons étudier les propriétés structurales telles que (le paramètre du réseau, le module de compressibilité) et les propriétés électroniques telles que (la structure de bandes, la densité d'états totale et partielle) ainsi que les propriétés élastiques de l'alliage HEUSLER FeTiSn et CoTiSn.

Les résultats sont obtenus par le code WIEN2k [1] dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) [2] à partir de la méthode des ondes planes augmentées (FP-LAPW) [3]. Pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation (GGA) de PERDEW, BURK et ERNZERHOF [4].

Dans la méthode FP-LAPW les fonctions d'onde de KOHN et SHAM sont développées en termes d'harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères MT pour une valeur maximale de $l_{max}=10$ et en série de Fourier dans la région interstitielle. Les ondes planes sont limitées à $RMT.K_{max}=8$ (ou RMT est le plus petit rayon de la sphère MT et K_{max} est le maximum du vecteur d'onde K). Le nombre de K point utilisé pour échantillonner la première zone de Brillouin dans l'espace réciproque est pris égal à 455 valeur suffisante pour converger l'énergie totale. Le processus des itérations self-consistant est répété jusqu'à l'énergie de convergence inférieure ou égale à la valeur de 10^{-4} Ry.

III. 2. Détail de calcul

Les calculs effectués dans cette thèse utilisent la méthode des ondes planes augmentés et linéarisées FP-LAPW implémentée dans le code WIEN2k. L'énergie d'échange et de corrélation est paramétrée par l'approximation du gradient généralisé (GGA) proposée par PERDEW-Burke-ERNZERHOF. Pour l'étude des propriétés électroniques et magnétiques, on a utilisé l'approximation GGA-PBE.

Dans toutes les trois types, le paramètre $RMT.K_{max}$ est pris égal à 8 où RMT est le plus petit rayon muffin-tin et K_{max} le module maximal de vecteur réciproque dans la première zone de Brillouin et l'expansion des fonctions d'onde a été réglée à $L_{max} = 10$ à l'intérieur du muffin-tin. La grandeur du vecteur le plus grand dans l'expansion de Fourier de densité de charge G_{max} égale à 14. L'intégration de la zone de Brillouin est réalisée avec 120 k points basés sur un

maillage de $15 \times 15 \times 15$ équivalent à 2000 k-points. Le processus d'auto consiste s'arrêter quand l'énergie de convergence soit égale à 10^{-5} Ry.

Le code WIEN2k permet le calcul des trois constantes élastiques indépendantes C_{11} , C_{12} et C_{44} pour les systèmes cubiques en calculant l'énergie du cristal par rapport aux changements de volume. Les autres paramètres élastiques, comme le module d'élasticité et le module de cisaillement, l'anisotropie élastique, et le coefficient de poisson, peuvent également être obtenus à partir de ces constantes indépendantes

III. 3. Propriétés structurale

L'étude des propriétés structurales présente un intérêt majeur, car elle permet de recueillir des informations sur la structure microscopique des matériaux et aura donc un impact relativement important sur la prédiction des autres propriétés.

Les paramètres d'équilibre de réseau ont été calculés en minimisant l'énergie totale par rapport aux paramètres de la cellule et aux positions atomiques, pour obtenir les propriétés structurales (voir **Tableau III.1**).

La courbe donnant l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire est ajustées à l'aide de l'équation de MURNAGHAN [5].

La **figure. III.1** et **figure. III.2** présente l'énergie totale en fonction de l'unité de performance volumique du FeTiSn et CoTiSn. Pour nos composés, la configuration de type I devrait être l'état le plus stable.

Les paramètres structuraux obtenus à l'équilibre statique (0K et 0GPa) sont présentés dans le **tableau III.1**.

Alliage	a	B	B'	V	E
FeTiSn	6.05	132.87	4.03	379.58	-16611.4742
CoTiSn	6.12	146.12	4.22	365.82	-16852.8669

Tableau III.1 : Le paramètre de réseau a (*bohr*), le module de compressibilité B (*Gpa*), sa première dérivée de pression B' , le volume V (*bohr*)³ et l'énergie totale minimale E (*Ry*).

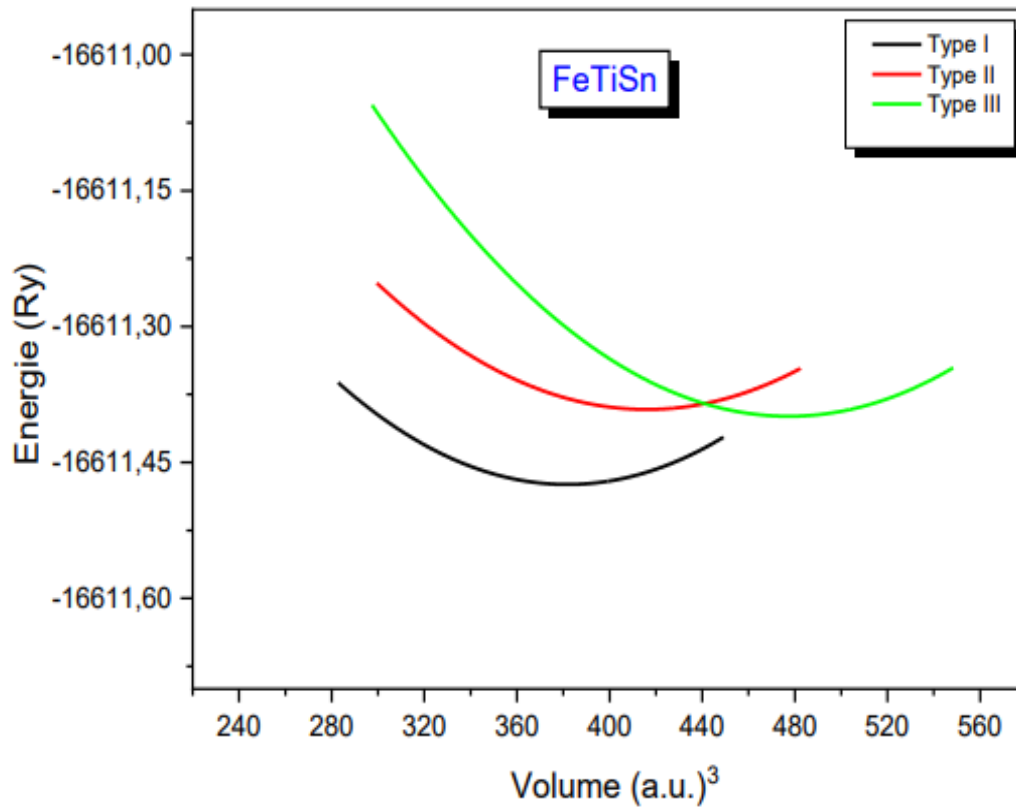


Figure III.1 : Variation de l'énergie totale du composé FeTiSn en fonction du volume.

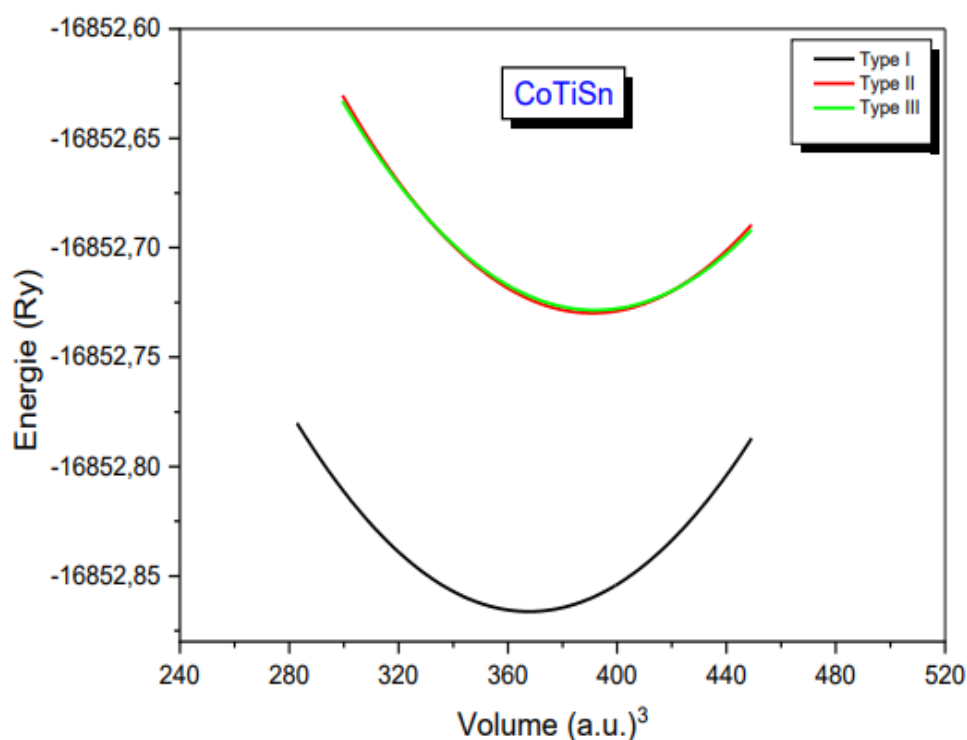


Figure III.2 : Variation de l'énergie totale du composé CoTiSn en fonction du volume.

III. 4. Propriétés électroniques

L'importance de cette partie réside dans le fait qu'elle nous permet de déterminer et d'analyser la nature d'un composé.

III. 4.1. Structure des bandes

La structure électronique des bandes du composé FeTiSn et CoTiSn est calculée selon les directions de symétrie dans la première zone de Brillouin (ZB), comme le montre la **figure III.3**.

Nous avons noté que les deux cantals de spin minoritaire et spin majoritaire sont métallique, pour FeTiSn et CoTiSn autour du niveau de Fermi. Cela confirme que notre matériau est un ferromagnétique métallique (FM).

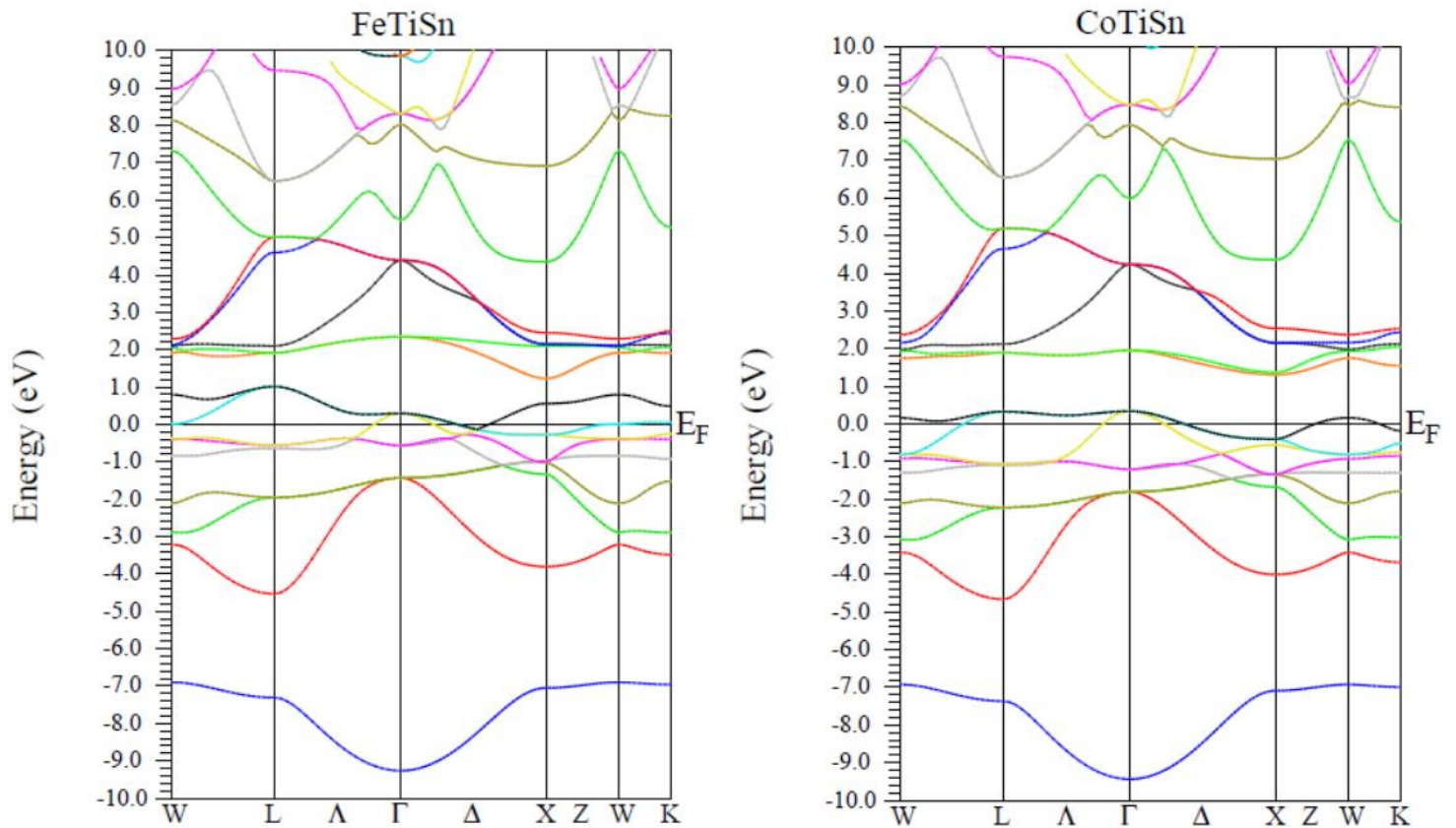


Figure III.3 : Structure des bandes des composés FeTiSn et CoTiSn.

III. 4.2. Densité d'états (DOS)

Dans cette section nous décrivons comment il est possible de calculer quelques propriétés électroniques importantes. Cette importance réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et comprendre la nature de ces matériaux pour une exploitation optimale. Ces propriétés comprennent la densité d'état (DOS pour : Density Of States). Le niveau de Fermi (E_F) est fixé à 0 eV.

Les états **Fe** ($4s^23d^6$), **Ti** ($4s^23d^2$) et **Sn** ($5p^2$) sont traités comme des électrons de valence du composé FeTiSn.

Les états **Co** ($4s^23d^7$), **Ti** ($4s^23d^2$) et **Sn** ($5p^2$) sont traités comme des électrons de valence du composé CoTiSn.

Sur la **Figure III. 4**, on peut voir que la région entre -5 et -2.5 eV, est principalement due aux états 3d du **Fe** et 3d du **Ti** et à une petite contribution d'état 5p du **Sn** pour FeTiSn, et aux états 3d du **Co** et 3d du **Ti** et à une petite contribution d'état 5p du **Sn** pour CoTiSn.

- De plus, la région comprise entre -2.5 et 0 eV présente une forte contribution de l'état 3d du **Fe** et de l'état 5p du **Sn** et une faible contribution de l'état 3d du **Ti** pour ce matériau.
- La région comprise entre -2.5 et 0 eV présente une forte contribution de l'état 3d du **Co** et de l'état 5p du **Sn** et une faible contribution de l'état 3d du **Ti** pour ce matériau.
- La région comprise entre 0 et 5 eV présente une forte contribution de l'état 3d du **Ti** et une faible contribution des orbitales 3d de l'atome **Fe** et 5p de **Sn** pour ce matériau.
- La région comprise entre 0 et 5 eV présente une forte contribution de l'état 3d du **Ti** et une faible contribution des orbitales 3d de l'atome **Co** et 5p de **Sn** pour ce matériau.

Par conséquent, FeTiSn et CoTiSn a un comportement métallique et sa densité d'états est dominée par les états 3d du **Fe** et 3d du **Co**.

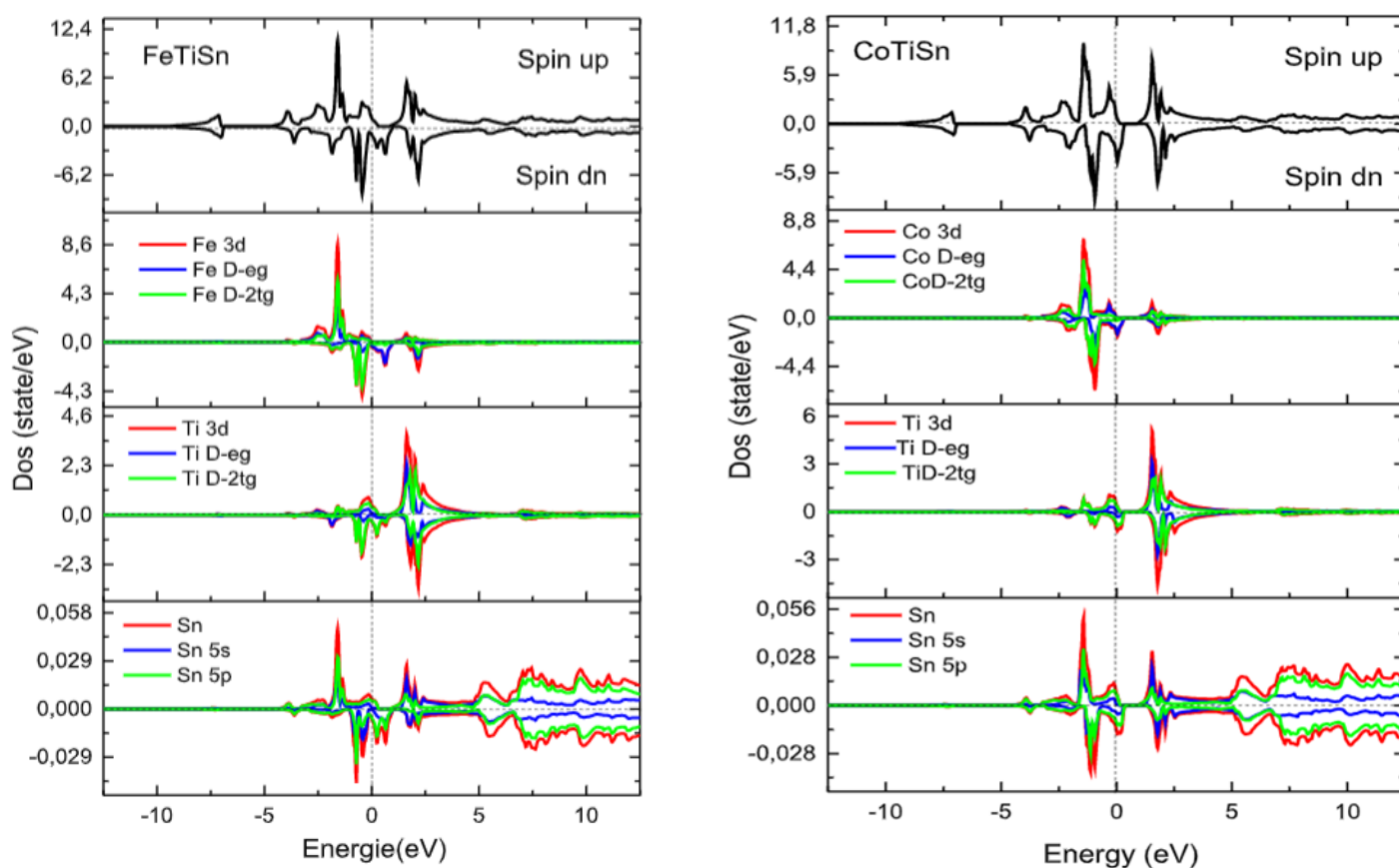


Figure III.4 : Densité totale et partielle des états des deux alliages FeTiSn et CoTiSn.

III. 5. Propriétés magnétiques

Afin de déterminer le comportement magnétique du HEUSLER FeTiSn et CoTiSn, nous avons calculé les moments magnétiques totaux et partiels en utilisant l'approximation GGA (Tableau III. 2).

Matériaux	μ_X	μ_{Ti}	μ_{Sn}	μ_I	μ_{tot}
FeTiSn	1.64	-0.12	0.01	0.15	1.68
CoTiSn	0.44	0.25	0.01	0.20	0.90

Tableau III.2 : Moment magnétique total et partiel en (μ_B) du FeTiSn et CoTiSn.

Nous observons que la principale contribution du moment magnétique total (M_{tot}) provient de l'atome **Fe** avec un moment magnétique partiel de 1.64 μ_B (FeTiSn).

Nous observons que la principale contribution du moment magnétique total (M_{tot}) provient de l'atome **Co** avec un moment magnétique partiel de 0.44 μ_B (CoTiSn).

Pour les autres atomes, les moments magnétiques positifs indiquent que l'interaction des spins s'aligne dans la même direction (signe positive).

III. 6. Propriétés élastiques

Pour confirmer la stabilité de ce composé, les constantes élastiques (C_{ij}) sont calculées en utilisant la méthode contrainte-déformation sous l'approche (GGA-PBE).

Pour un cristal cubique, il n'y a que trois constantes élastiques indépendantes : C_{11} , C_{12} et C_{44} , où les conditions de stabilité mécanique doivent être ($C_{11} - C_{12} > 0$; $C_{11} + 2 C_{12} > 0$; $C_{44} > 0$ et $C_{12} < B < C_{11}$) [6].

Selon les valeurs obtenues présentées dans le **tableau III.3**, les critères ci-dessus sont satisfaits, confirmant la stabilité mécanique du FeTiSn et du CoTiSn en phase cubique.

D'autres paramètres macroscopiques tels que le module de cisaillement (G), le module de compressibilité (B), le coefficient de Poisson (ν), le facteur d'anisotropie (A) et le module de

Young (E) peuvent être calculés en utilisant l'approximation de Voigt – Reuss – Hill [7, 8] selon aux expressions suivantes :

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5; \quad G_R = 5C_{44}(C_{11} - C_{12})/[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})] \quad (\text{III. 1})$$

$$G = (G_V + G_R)/2 \quad (\text{III. 2})$$

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (\text{III. 3})$$

$$\nu = (3B - 2G)/[2(3B + G)] \quad (\text{III. 4})$$

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (\text{III. 5})$$

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (\text{III. 6})$$

Alliage	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	A	G	E	B/G	ν
FeTiSn	160.18	121.14	80.10	134.15	4.103	45.802	123.36	2.928	0.34
CoTiSn	174.32	131.16	75.46	145.54	3.496	45.831	124.43	3.175	0.35

Tableau III.3 : Les constantes élastiques calculées C_{ij} (GPa), module de compressibilité B (GPa), module de cisaillement G (GPa), coefficient de Poisson ν , facteur d'anisotropie A et module de Young E (GPa) du composé FeTiSn et du CoTiSn.

Nous observons que la valeur calculée du module de compressibilité (B) à partir des constantes élastiques est conforme au résultat obtenu à partir des ajustements de l'équation de BIRCH MURNAGHAN (EBM) (voir **tableau III.1**).

✓ comparaison entre FeTiSn et CoTiSn

Le rapport de Pugh (B / G) qui sépare le comportement ductile et fragile est égale à **1.75** : (fragile < **1,75** < ductile) [9].

Les données de **tableau III.3** indique le rapport B / G correspondant à un alliage HEUSLER du FeTiSn et CoTiSn (**2.928** et **3.175**) respectivement. On déduit que ces deux composés sont classés comme des matériaux ductiles.

De plus, le coefficient de Poisson peut être également utilisé pour définir la ductilité ou la fragilité du matériau [10]. Dans cette étude, ν est égal à **0.34** et **0.35** du FeTiSn et CoTiSn respectivement. Donc les deux matériaux sont considéré comme ductiles. Un autre indice lié à la ductilité est la pression de Cauchy, définie comme la différence entre les deux constantes élastiques ($C_{12} - C_{44}$) [11]. La valeur positive de pression de Cauchy est de **41.04 GPa** et **55.7 GPa** du FeTiSn et CoTiSn respectivement.

Les valeurs calculées de l'anisotropie A sont d'environ **4.103** et **3.496** du FeTiSn et CoTiSn respectivement. Elles s'écartent significativement de l'unité (**tableau III.3**), ce qui explique l'anisotropie du FeTiSn et CoTiSn.

De plus, une valeur élevée du module de Young (E) indique un matériau rigide [12, 13]. Le module de Young calculé est de **123.36 GPa** et **124.43 GPa** du FeTiSn et CoTiSn respectivement. Ce qui suggère que les deux des matériaux sont flexibles.

III .7. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et élastiques des matériaux FeTiSn et CoTiSn. Nos résultats peuvent être résumés comme suit :

- ⌘ On trouve que la configuration de type I pour les deux matériaux devrait être l'état le plus stable.
- ⌘ On confirme que notre matériau (FeTiSn et CoTiSn) est un ferromagnétique métallique (FM).
- ⌘ On constate que FeTiSn et CoTiSn à un comportement métallique et sa densité d'états est dominée par les états 3d du Fe et 3d du Co.
- ⌘ Nous observons que la principale contribution du moment magnétique total (M_{tot}) provient de l'atome Fe et Co du (FeTiSn) et (CoTiSn) respectivement.
- ⌘ Les deux matériaux (FeTiSn et CoTiSn) sont ductiles, anisotropes et rigides.

III. Référence

- [1] 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).
- [2] W. KOHN AND L. J. SHAM, PHYS. REV. 140, 1133A (1965).
- [3] S J. P. PERDEW, K. BURKE AND M. ERNZERHOF, PHYS. REV. LETT. **77**, 3865 (1996).
- [4] E. KULKOVA, S. V. EREMEEV, S. S. KULKOV, SOLID STATE COMMUN. 130, 793 (2004).
- [5] F. D. MURNAGHAN, PROC. NATL. ACAD. SCI. USA 30, 5390(1944).
- [6] R. HILL, PROC. W. VOIGT, LEHRBUCH DER KRISTALLPHYSIK, GERMANY, LEIPZIG: B.G. TEUBNER, 1928.
- [7] PHYS. SOC. A. 65, 349 (1952).
- [8] A. REUSS, Z. ANGEW, MATH. MECH. 9, 49 (1929).
- [9] S. F. PUGH, PHILOS. MAG. 45, 823 (1954).
- [10] R. MAJUMDER, M. M. HOSSAIN AND D. SHEN, MOD. PHYS. LETT. B 33, 1950378 (2019).
- [11] O. YOUB, Z. AZIZ, F. Z. MEGHOUFEL, B. BOUADJEMI, D. CHENINE, T. LANTRI AND S. TERKHI, MOD. PHYS. LETT. B 33, 1950362 (2019).
- [12] N. KOROZLU, K. COLAKOGLU, E. DELIGOZ AND S. AYDIN, J. ALLOYS. COMPD. 546, 157 (2013).
- [13] G. CHEN AND P. ZHANG, DEFENCE. TECH. 9, 131 (2013).

Conclusion générale

Notre mémoire de Master a été réalisé au laboratoire « Technologie et propriétés des solides (LTPS), Département des Sciences et de la Technologie, Faculté des Sciences et de la Technologie, Université ABDELHAMID IBN BADIS DE MOSTAGANEM.

Au cours de cette approche, nous faisons des investigations sur les différentes propriétés physiques des matériaux étudiés FeTiSn et CoTiSn à l'aide de la méthode FP-LAPW dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et de corrélation est traitée par l'approximation du gradient généralisé (GGA). 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 et élastiques de l'alliage HEUSLER FeTiSn et CoTiSn.

Nous avons commencé à calculer les propriétés structurales dans les trois configurations possibles à savoir le type (I), le type Y(II) et le type (III) prises dans la phase ferromagnétique. Les résultats obtenus montrent que ces deux matériaux sont stables 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')).

La deuxième étape de ce modeste travail a été consacrée aux propriétés structurales, électroniques et élastiques, où le bilan des résultats nous a permis de faire les conclusions suivantes :

- ⌘ L'étude de la structure des bandes électroniques montre que les composés FeTiSn et CoTiSn ont un caractère métallique ferromagnétique (FM).
- ⌘ La densité d'états donne une explication détaillée sur la contribution des atomes pour des différentes orbitales dans la structure électronique. Par conséquent, FeTiSn et CoTiSn ont un comportement métallique et ses densités d'états sont dominées par les états Co-d et Fe-d.
- ⌘ Les propriétés magnétiques sont estimées en raison du calcul des moments magnétiques locaux de chaque atome ainsi que le moment magnétique total pour nos composés.

- ⌘ Le moment magnétique est principalement originaire des éléments de transition Co et Fe.
- ⌘ Les constantes élastiques C_{ij} obéissent aux conditions de stabilité cubique et indiquent que FeTiSn et CoTiSn sont ductiles et anisotropes.
- ⌘ Le module de compressibilité calculé à partir des constantes élastiques telles que : $B = (1/3) (C_{11} + 2 C_{12})$ a presque la même valeur que celui obtenu à partir de l'équation d'état de l'EOS de BIRCH MURNAGHAN.

Finalement, et à partir de tous ces résultats, il est évident que les deux composés HEUSLER étudié sont des très bon candidats pour les futures applications dans le domaine magnéto-électronique telle que : les dispositifs d'injection de spin, les filtres à spin, les jonctions de tunnels ou les dispositifs à magnétorésistance (GMR).

Ce travail ouvre des perspectives en sciences des matériaux pour l'intégration des outils de la fouille de données, très efficaces et peu coûteuses en temps et effort de calcul.