



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
People's Democratic republic of Algeria  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
Ministry of Higher Education and Scientific Research  
جامعة عبد الحميد بن باديس - مستغانم  
Abdelhamid Ibn Badis University - Mostaganem  
كلية العلوم والتكنولوجيا  
Faculty of Sciences and Technology  
قسم هندسة الطرائق  
Department of Process Engineering



*Department of Process Engineering*

قسم هندسة الطرائق

The Date

التاريخ :

Ref :...../U.M/F.S.T/2023

رقم :..... / ج.م.ك.ع.ت//2023

## MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

**Filière : Génie des procédés**

**Option: Génie Chimique**

### Thème

**Etude théorique des propriétés fondamentales du matériau binaire  
RaBi**

Présenté par

1-AMOURI Abdelkrim Ahmed

Soutenu le 13/06/ 2023 devant le jury composé de :

Présidente : CHERID Samira MCA Université de Mostaganem

Examinatrice : FARES Zineb MAA Université de Mostaganem

Rapporteur : BENATMANE Saadiya MCA Université de Mostaganem

Année Universitaire 2022/2023

**Résumé :** La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) basée sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) est utilisée pour étudier les propriétés structurales, électroniques et magnétiques du composé binaire RaBi. Le composé RaBi a été calculé dans différentes phases cristallines: NaCl (B1), CsCl (B2), ZB (B3), NiAs (B81) et WZ (B4), en utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE) et l'approximation de Becke-Johnson modifiée (mBJ-GGA-PBE) pour l'énergie et le potentiel d'échange-corrélation. Les paramètres de maille, les modules de compressibilités, leurs dérivées premières par rapport à la pression et les paramètres internes calculés sont en bon accord avec d'autres données théoriques. La structure de bande électronique et la densité d'états montrent qu'il se produit un caractère demi-métallique et magnétique, qui peut être attribué à la présence des orbitales de type  $p$  polarisée en spin dans Bi. Le composé binaire RaBi présente un caractère demi-métallique, avec un moment magnétique entier de  $2 \mu\text{B}$  par unité de formule et un gap demi-métallique.

**Mots Clés :** Demi-metal, propriétés magnétiques, GGA-PBE, DFT, ferromagnétique.

**Abstract:** First-principles full-potential linearized augmented plane-wave method (FP-LAPW) based on density functional theory (DFT) are used to investigate the structural, electronic and magnetic properties of RaBi binary compound. The MgN compound in different crystalline phases: NaCl (B1), CsCl (B2), ZB (B3), NiAs (B81) and WZ (B4) is calculated within the generalized gradient approximation (GGA-PBE) and the modified Becke-Johnson approach (mBJ-GGA-PBE) for the exchange-correlation energy and potential. The calculated lattice parameters, bulk moduli, their first-pressure derivatives and internal parameters are in good agreement with the other theoretical data. The electronic band structure and density of states show that half-metallic and magnetic character arises, which can be attributed to the presence of spin polarized  $p$  orbitals in Bi. The RaBi binary compound shows half-metallic character with an integer magnetic moment of  $2 \mu\text{B}$  per formula unit and half-metallic gap.

**Keys Words:** Half-metallicity, magnetic properties, GGA-PBE, DFT, ferromagnet.

**ملخص :** تستخدم المبادئ الأولى وذلك باستخدام طريقة الموجات المستوية المعدلة الخ طية لجهد تام (FP-LAPW) المبنية على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) (K2WIEN) نائية RaBi, يتم حساب مركب RaBi في مراحل بلورية مختلفة: NaCl (1B), CsCl (2B), ZB (3B), NiAs (81B), WZ ن خلال حساب ثابت الشبكة و معاملات الانضغاطية ومشتقاتها وحساب الحجم لكل تركيب الذي تتكون عنده كل بلورة. ومن ثم استخدمنا أسلوب نهج باك جونسون المعدل (PBE-GGA-mBJ) لحساب مستويات الطاقة وتحديد فجوة الطاقة. مما يمكن أن يعزى ذلك إلى وجود مدارين مستقطبين للدوران في النتروجين. يظهر المركب الثنائي RaBi تابع شبه معدني بلحظة مغناطيسية صحيحة قدرها ( $2 \mu\text{B}$ ) لكل وحدة صيغة وفجوة طاقة نصف معدنية.

**الكلمات المفتاحية :** نصف معدني – الخصائص المغناطيسية - DFT -GGA -PBE- فرو مغناطيسي

## **Dédicaces**

*C'est avec immense fierté et respect que je dédie ce modeste travail :  
A ma mère qui m'a aidé et soutenue pendant de nombreuses années  
avec à chaque fois une attention renouvelée.*

*A mon père qui grâce à lui et ma maman, j'ai appris le sens du travail  
et de la responsabilité.*

*A mes frères et mes sœurs, en signe de l'affection et du grand amour  
que je vous porte pour vous, les mots sont insuffisants pour exprimer ma  
profonde estime.*

A mon ami :

*Je trouve en toi le conseil de frère et le soutien d'un ami.*

A toute ma famille

*Que dieu le tout puissant vous comble de santé, de bonheur et vous  
prouve une longue vie pleine de joie.*

## **Remerciements**

Je voudrais exprimer ma profonde reconnaissance envers ma directrice de mémoire, **Madame BENATMANE Saadiya**, pour son encadrement, ses conseils, son soutien et son orientation tout au long de la rédaction de mon travail de recherche.

J'exprime également mes remerciements à **Madame Cherid Samira**, enseignante à l'université de Mostaganem, qui m'a fait l'honneur de s'intéresser à ce travail et de présider le jury d'examen.

Que **Madame Fares Zineb** enseignante à l'université de Mostaganem, trouve ici toute ma reconnaissance pour avoir accepté de porter un regard critique sur cet humble travail de recherche.

Mes sincères remerciements vont également aux professeurs, intervenants et à toutes les personnes qui ont contribué à l'avancement de mes réflexions en acceptant de me rencontrer et de répondre à mes questions durant mes recherches. Leurs paroles, écrits, conseils et critiques ont été des éléments essentiels pour la réussite de mon travail.

Je souhaite exprimer ma gratitude à mes parents ainsi qu'à mes chers frères et sœurs pour leur présence et leur soutien sans faille tout au long de mes études.

Enfin, mes amis ont été une source de soutien indéfectible et d'encouragements précieux, je leur en suis profondément reconnaissant.

Je présente mes sincères remerciements, ma profonde reconnaissance et mon respect à tous ceux qui m'ont apporté leur aide et leur soutien durant la réalisation de ce mémoire.

## Liste des figures

Figure II.1	Représentation des structures utilisées pour le binaires RaBi	22
Figure II.2	Optimisation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'approximation GGA-PBE.	27
Figure II.3	Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du RaBi (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.	32
Figure II.4	Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du RaBi La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.	35

## Liste des tableaux

Tableau II.1	Le groupe d'espace et les coordonnées Wyckoff des différentes structures cristallines utilisées dans notre calcul : CsCl, NaCl, ZB, NiAs, WZ	20
Tableau II.2	Valeurs des calculs ferromagnétique, non ferromagnétique et anti ferromagnétique en utilisant GGA-PBE du paramètre de réseau d'équilibre $a$ (Å), module de compressibilité $B$ (GPa), sa dérivée ( $B'$ ), et la différence d'énergie entre les états ferromagnétique et non magnétique $\Delta E = E_{FM} - E_{NM}$ (meV), énergie de cohésion $E_c$ (Ry) et l'énergie de formation $E_f$ (Ry)	23
Tableau II.3	les constantes et les paramètres élastique	30
Tableau II.4	Valeurs des moments magnétiques, $\mu_{Total}$ ( $\mu_B$ /molécule), par atome $\mu_{Ra}$ , $\mu_{Bi}$ ( $\mu_B$ )	31
Tableau II.5	Valeurs du gap $E_g$ (eV) et du gap demi métallique (gap DM en eV) en utilisant l'approximation GGA-PBE et mBJ-GGG-PBE	32

## Liste des abréviations

DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité (Density functional theory)
GGA	Approximation du gradient généralisée (Generalized gradient approximation)
LDA	Approximation de densité Locale (Local Density Approximation)
mBJ	l'approche de Becke-Johnson modifiée
FP-LAPW	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total
SCF	Self Consistent Field
NM	Non-magnétique (Non-magnetic)
FM	Ferromagnétique (Ferromagnetic)
B	Module de compressibilité (Bulk modulus)
A	Paramètre de maille (Lattice parameter)
$E_c$	Energie de cohésion (The cohesive energy)
$E_f$	Energie de formation (The formation energy)
DOS	Densité d'états (Density of States)
HM	gap demi-métallique (half-metallic gap)
$E_f$	Niveau de Fermi (Fermi level)

# Table des matières

<b>Introduction Générale</b> .....	1
REFERENCES.....	4
<b>Chapitre I. Formalisme et méthodes de calculs</b> .....	8
I.1 Introduction.....	8
I.2 Les approximations proposées pour résoudre l'équation de Schrödinger... ..	9
I.2.1 L'approximation de Born Oppenheimer.....	9
I.2.2 Approximation de Hartree .....	9
I.2.3 Approximation de Hartree-Fock.....	9
I.3 Fondement de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).....	10
I.3.1 Principe .....	10
I.3.2 La densité électronique .....	10
I.3.3 Premier théorème de Hohenberg et kohn.....	11
I.3.4 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn .....	12
I.3.5 L'approximation de densité Locale (LDA) .....	12
I.3.6 L'approximation du gradient généralisé (GGA) .....	13
I.4 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) .....	13
I.5 Le code Wien2k.....	14
I.6 Conclusion.....	15
REFERENCES.....	17
<b>Chapitre II. Résultats et discussions</b> .....	18



II.1 Introduction.....	18
II.2 Détails de calculs.....	19
II.3 Propriétés structurales du composé RaBi.....	23
II.4 Propriétés élastiques.....	27
II.5 Les propriétés magnétiques.....	30
II.6 Propriétés électroniques.....	31
II.6.a Structure de bande du composé RaBi.....	31
II.6.b Densité d'états du composé RaBi.....	33
II.7 Conclusion .....	35
REFERENCES.....	37
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>38</b>

## **Introduction Générale**

L'industrie électronique a été révolutionnée pendant les quatre dernières décennies en raison de la miniaturisation continue de circuits intégrés. Alors que l'électronique exploite la charge de l'électron, l'électronique de spin ou spintronique s'appuie sur une autre caractéristique de ces particules, leur spin. La spintronique, est devenue ainsi le concept de base de la prochaine génération de dispositifs électroniques [1-4]. Les applications de la spintronique sont basées sur des soupapes de spin extrêmement sensible au champ magnétique (la magnétorésistance géante (GMR) de multicouches magnétiques) où deux couches de matériaux magnétiques prennent en sandwich une couche non-magnétique.

Le concept de la spintronique est de prendre l'avantage à la fois de la charge électronique et du spin, et par conséquent ses applications exigent des matériaux magnétiques avec des électrons fortement polarisés en spin au niveau de Fermi [5]. Ceci peut être réalisé par des aimants ferrimagnétiques demi-métalliques (DM) [6] avec une température de Curie plus élevée que la température ambiante. La pierre angulaire de la spintronique est la génération, l'injection et le transport de courants polarisés en spin. Une recherche énorme est consacrée pour concevoir de nouveaux matériaux pour manipuler le courant polarisé en spin pour l'application pratique dans la spintronique [7].

L'approche conventionnelle est basée sur des jonctions tunnel magnétiques (JTM) dans les quels deux électrodes ferromagnétiques sont séparées par une barrière isolante non magnétique. Dans une JTM, le courant de tunnel dépend de l'orientation de la magnétisation relative des électrodes, un effet connu comme la magnétorésistance tunnel [8].

Une approche alternative est d'utiliser un filtre de spin où le matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique est utilisé comme une barrière dans une jonction tunnel avec des électrodes non magnétiques [9]. Le filtrage de spin compte sur des probabilités différentes pour des électrons avec des spins opposés à être transmis par une barrière d'énergie dépendante de spin du matériau isolant ferromagnétique ou ferrimagnétique. La dépendance en spin de la barrière d'énergie est due à un éclatement des bandes, qui mène un minimum de la bande de

conduction et/ou un maximum de la bande de valence à des énergies différentes des électrons de spin majoritaires et minoritaires.

Récemment, de grands progrès ont été réalisés dans les super-réseaux magnétiques, à la fois expérimentalement et théoriquement, où divers phénomènes caractéristiques des propriétés magnétiques et thermodynamiques des super-réseaux magnétiques ont été découverts [10, 11]. Les jonctions tunnels magnétiques (JTM) ont été étudiés de manière intensive en raison de leurs applications prometteuses dans les dispositifs spintroniques, tels que les têtes de lecture des disques durs [12], les oscillateurs hyperfréquences magnétiques aléatoires [13], ainsi que les capteurs ou les mémoires magnétiques non volatiles à accès aléatoire [14-16].

Deux couches ferromagnétiques séparées par une fine couche d'isolant (ou barrière *tunnel*) conduisent à une jonction tunnel magnétique. Les électrons peuvent traverser la fine barrière en appliquant une tension de polarisation entre les couches adjacentes, formant ainsi un courant tunnel. Ce courant tunnel révèle un déséquilibre de spin entre les électrons de spins majoritaires et minoritaires. La polarisation de spin de ce courant tunnel conduit à la magnétorésistance à effet *tunnel*, ou magnétorésistance *tunnel* (TMR) [17, 18]. Les efforts actuels se poursuivent dans deux directions principales: premièrement approfondir les connaissances et les technologies basées sur la TMR, en développant de nouveaux matériaux présentant des polarisations de spin élevées.

Les demi-métaux sont considérés comme les candidats prometteurs pour augmenter la réponse TMR des jonctions tunnels magnétiques (JTM), car ils utilisent des couches magnétiques pour lesquelles les rapports TMR peuvent être déterminés par les polarisations de spins au niveau de Fermi. Au-delà, beaucoup de travaux expérimentaux et théoriques ont été réalisés [19-25]. La plupart des matériaux ferromagnétiques demi-métalliques (DM) sont généralement utilisés sous forme de films minces ou multicouches dans des dispositifs spintroniques [26]. Le composé

RaBi qui est extrêmement intéressant en raison de sa similarité structurelle avec le composé BaBi, et largement utilisé comme barrière tunnel dans les jonctions tunnels magnétiques (JTM) [27]. Droghetti *et al.* [27] suggèrent que si le composé RaBi peut être fabriqué, le système RaBi/BaBi peut se présenter comme un nouveau prototype de matériaux pour les jonctions tunnels magnétiques (JTM) n'incorporant aucun métal de transition.

Les matériaux demi-métalliques (DM) [28] qui sont les matériaux les plus importants pour la spintronique, se comportent comme des métaux dans l'une des directions de spins tandis que l'autre direction de spins possède un gap (peuvent être des semi-conducteurs ou des isolants).

En effet, une seule direction des spins est métallique, ce qui entraîne une polarisation de 100% des électrons au niveau de Fermi [28, 29]. Les DM ont montré des applications potentielles dans la spintronique comme des filtres de spin, des détecteurs, des capteurs, et possèdent une magnétorésistance théoriquement infinie [30].

Les demi-semi-conducteurs (DSC) ou les semi conducteur des métaux de transition [31] [32] sont des nouveaux matériaux qui montrent des caractéristiques semi-conducteurs, où les électrons et les trous sont polarisés en spin et partagent la même direction de spin, et par conséquent, la polarisation de spin totale est de 100%. Ces nouveaux matériaux se présentent comme des nouveaux candidats potentiels dans des applications attirantes comme la magnétorésistance négative [8, 33] et l'injection et/ou la détection de courants polarisés en spin [34, 35], pour produire et manipuler des courants de spin. D'autre part, si la bande de conduction et de valence se touchent au niveau de Fermi, il s'agit d'une nouvelle classe de matériaux qui sont les semi-conducteurs sans gap (gapless semiconductors). Ces nouveaux matériaux avec des électrons et des trous totalement spin-polarisés ont été proposés pour la première fois par Wang [36].

Actuellement, plusieurs nouveaux matériaux de type  $d^0$  ou les demi-métaux  $sp$  avec une hybridation  $sp$  attirent beaucoup d'attention [37-43] en raison de l'absence d'atomes de métaux de transition. Ils sont prédits être demi-métalliques par des calculs théoriques [44, 45]. Dans ces composés, les moments magnétiques sont principalement portés par les électrons  $p$  de l'anion [46].

Le but du présent travail est de fournir une description détaillée basée sur des calculs de premier-principes des propriétés structurales, magnétiques, élastiques et électroniques du composé RaBi. Dans le but fournir une image plus compréhensive du caractère demi-métallique du composé RaBi,

Notre travail se présente de la façon suivant : Le deuxième chapitre traite d'une manière plus ou moins détaillée la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) depuis sa découverte jusqu'à sa contribution à l'étude des propriétés des différents matériaux, avec un aperçu relatif de la méthode linéaire des ondes planes augmentées avec potentiel total (FP-LAPW) car l'ensemble des calculs effectués dans le cadre de ce travail ont été réalisés avec cette méthode. Quant au dernier chapitre, il est entièrement consacré aux résultats obtenus et de leurs interprétations et on terminera par une conclusion.

**REFERENCES**

- [1] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, *Angewandte Chemie International Edition* 46 (2007) 668-699.
- [2] E.Y. Tsymbal, I. Zutic, *Handbook of spin transport and magnetism*, CRC press, 2011.
- [3] H. Sukegawa, Y. Miura, S. Muramoto, S. Mitani, T. Niizeki, T. Ohkubo, K. Abe, M. Shirai, K. Inomata, K. Hono, *Physical Review B* 86 (2012) 184401.
- [4] T. Nozaki, H. Kubota, A. Fukushima, S. Yuasa, *Applied physics express* 6 (2013) 053005.
- [5] I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma, *Reviews of Modern Physics* 76 (2004) 323.
- [6] J.M.D. Coey, M. Venkatesan, *Journal of Applied Physics* 91 (2002) 8345-8350.
- [7] S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman, J. Daughton, S. Von Molnar, M. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D. Treger, *Science* 294 (2001) 1488-1495.
- [8] E.Y. Tsymbal, O.N. Mryasov, P.R. LeClair, *Journal of Physics: Condensed Matter* 15 (2003) R109.
- [9] T.S. Santos, J.S. Moodera, ed. Tsymbal, EY and Zutic, I., CRC Press, Boca Raton, FL (2012) 251-266.
- [10] L. Guo, Y. Wang, J. Wang, S. Muraishi, T. Sannomiya, Y. Nakamura, J. Shi, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 394 (2015) 349-353.
- [11] N. Bannikova, M. Milyaev, L. Naumova, V. Proglyado, T. Krinitsina, T. Chernyshova, V. Ustinov, *The Physics of Metals and Metallography* 116 (2015) 156-161.
- [12] S. Bae, J.H. Judy, I.-F. Tsu, M. Davis, *Journal of Applied Physics* 94 (2003) 7636-7645.
- [13] S.I. Kiselev, J. Sankey, I. Krivorotov, N. Emley, R. Schoelkopf, R. Buhrman, D. Ralph, *Nature* 425 (2003) 380-383.
- [14] V. Serin, S. Andrieu, R. Serra, F. Bonell, C. Tiusan, L. Calmels, M. Varela, S.

- Pennycook, E. Snoeck, M. Walls, *Physical Review B* 79 (2009) 144413.
- [15] P. Freitas, R. Ferreira, S. Cardoso, F. Cardoso, *Journal of Physics: Condensed Matter* 19 (2007) 165221.
- [16] Z. Diao, D. Apalkov, M. Pakala, A. Panchula, Y. Huai, arXiv preprint cond-mat/0510204 (2005).
- [17] W.H. Butler, X.G. Zhang, T.C. Schulthess, J.M. MacLaren, *Physical Review B* 63 (2001) 054416.
- [18] M. Julliere, *Physics Letters A* 54 (1975) 225-226.
- [19] M. Bowen, M. Bibes, A. Barthélémy, J.-P. Contour, A. Anane, Y. Lemaitre, A. Fert, *Applied Physics Letters* 82 (2003) 233-235.
- [20] W. Kim, K. Kawaguchi, N. Koshizaki, M. Sohma, T. Matsumoto, *Journal of Applied Physics* 93 (2003) 8032-8034.
- [21] S. Tsunegi, Y. Sakuraba, M. Oogane, K. Takanashi, Y. Ando, *Applied Physics Letters* 93 (2008) 112506.
- [22] Y. Sakuraba, J. Nakata, M. Oogane, H. Kubota, Y. Ando, A. Sakuma, T. Miyazaki, *Japanese Journal of Applied Physics* 44 (2005) L1100.
- [23] W. Wang, H. Sukegawa, R. Shan, S. Mitani, K. Inomata, *Applied Physics Letters* 95 (2009) 182502.
- [24] N. Tezuka, N. Ikeda, S. Sugimoto, K. Inomata, *Japanese Journal of Applied Physics* 46 (2007) L454.
- [25] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. Ashizawa, Y. Lee, K. Miura, H. Hasegawa, M. Tsunoda, F. Matsukura, H. Ohno, *Applied Physics Letters* 93 (2008) 2508.
- [26] G. Gao, K. Yao, N. Li, *Journal of Physics: Condensed Matter* 23 (2011) 075501.
- [27] A. Droghetti, N. Baadji, S. Sanvito, *Physical Review B* 80 (2009) 235310.
- [28] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G.V. Engen, K.H.J. Buschow, *Physical Review Letters*

- 50 (1983) 2024-2027.
- [29] M. Torrichi, M. Ferhat, B. Bouhafs, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 414 (2016) 153-157.
- [30] M.I. Katsnelson, V.Y. Irkhin, L. Chioncel, A.I. Lichtenstein, R.A. de Groot, *Reviews of Modern Physics* 80 (2008) 315-378.
- [31] E. Rudberg, P. Salek, Y. Luo, *Nano Letters* 7 (2007) 2211-2213.
- [32] R.J. Borg, G.J. Dienes, *The physical chemistry of solids*, Academic Press, 1992.
- [33] B. Li, C.Y. Kao, J.W. Yoo, V.N. Prigodin, A.J. Epstein, *Advanced Materials* 23 (2011) 3382-3386.
- [34] R.G. Burns, *Mineralogical applications of crystal field theory*, Cambridge University Press, 1993.
- [35] J.-W. Yoo, C.-Y. Chen, H. Jang, C. Bark, V. Prigodin, C. Eom, A. Epstein, *Nature materials* 9 (2010) 638-642.
- [36] X. Wang, *Physical Review Letters* 100 (2008) 156404.
- [37] O. Volnianska, P. Bogusławski, *Physical Review B* 75 (2007) 224418.
- [38] O. Volnianska, P. Boguslawski, *Journal of Physics: Condensed Matter* 22 (2010) 073202.
- [39] G.Y. Gao, K.L. Yao, Z.L. Liu, J. Zhang, Y. Min, S.W. Fan, *Physics Letters A* 372 (2008) 1512-1515.
- [40] G.Y. Gao, K.L. Yao, *Applied physics letters* 91 (2007) 082512.
- [41] H. Sadouki, A. Belkadi, Y. Zaoui, S. Amari, K. Obodo, L. Beldi, B. Bouhafs, *International Journal of Computational Materials Science and Engineering* (2018) 1850015.
- [42] S. Benatmane, L. Beldi, H. Bendaoud, S. Méçabih, B. Abbar, B. Bouhafs, *Indian Journal of Physics* (2018) 1-12.

- [43] S. Benatmane, H. Bendaoud, L. Beldi, B. Bouhafs, S. Méçabih, B. Abbar, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* 31 (2018) 2767-2776.
- [44] H. Benaissa, H. Bendaoud, S. Amari, K.O. Obodo, L. Beldi, B. Bouhafs, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2018).
- [45] H. Benaissa, S. Benatmane, S. Amari, K. Obodo, L. Beldi, H. Bendaoud, B. Bouhafs, *Ferromagnetism in RaBi with Zinc-Blende and Wurtzite Structures: ab-initio Prediction*, in: *SPIN*, vol 8, World Scientific, 2018, p. 1850008.
- [46] K. Kusakabe, M. Geshi, H. Tsukamoto, N. Suzuki, *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004) S5639.



# Chapitre I

## Formalisme et méthodes de calculs

### I.1 Introduction

Les propriétés des semi-conducteurs sont gouvernées par le mouvement des électrons qui baignent dans un potentiel périodique généré par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Le système obéit à l'équation de Schrödinger :

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

L'opérateur hamiltonien du système s'écrit [1]:

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{noy}} + \hat{T}_{\text{él}} + \hat{V}_{\text{noy-él}} + \hat{V}_{\text{él-él}} + \hat{V}_{\text{noy-noy}} \quad (\text{II.2})$$

Où:

$\hat{T}_{\text{noy}}$  : est l'énergie cinétique des noyaux.

$\hat{T}_{\text{él}}$  : est l'énergie cinétique des électrons.

$\hat{V}_{\text{noy-él}}$  : est l'énergie d'interaction entre noyaux et électrons.

$\hat{V}_{\text{él-él}}$  : est l'énergie d'interaction des électrons.

$\hat{V}_{\text{noy-noy}}$  : est l'énergie d'interaction des noyaux.

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2} \sum \frac{\nabla_{\mathbf{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum \frac{\nabla_{\mathbf{r}_j}^2}{m_j} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 z_i z_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum \frac{e^2 z_i z_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (\text{II.3})$$

Où :

$\mathbf{R}_i, M_i$  : La position et la masse du noyau ;

$\mathbf{r}_j, m_j$  : La position et la masse de l'électron.

Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système de particules se trouvant en interaction, trois approximations sont utilisées pour résoudre cette équation.

## I.2 Les approximations proposées pour résoudre l'équation de Schrödinger

### I.2.1 L'approximation de Born Oppenheimer

Dans ce cas  $T_{\text{noy-noy}} = 0$ ,  $V_{\text{noy-noy}}$  est constante [2], l'hamiltonien peut s'écrire sous la forme:

$$\hat{H}^{el} = \hat{T}_{el} + \hat{V}_{\text{noy-el}} + \hat{V}_{el} \quad (\text{II.4})$$

Soit

$$\hat{H}^{elec} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^M \frac{z_{\alpha}}{r_{\alpha i}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.5})$$

Cette approximation permet de séparer les coordonnées des électrons et des noyaux, mais elle ne suffit cependant pas à elle seule à permettre la résolution de l'équation de Schrödinger, à cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est pourquoi elle est très souvent couplée à l'approximation de Hartree.

### I.2.2 Approximation de Hartree

En considérant que les électrons comme indépendants, chacun d'eux évoluant dans le champ créé par tous les autres [3]. A chaque électron correspond une orbitale et la fonction d'onde totale s'écrit comme un produit de fonction d'onde à une particule, orthogonales entre elles :

$$\psi(r_i) = \psi_1(r_1) \dots \psi_{N_e}(r_{N_e}) \quad (\text{II.6})$$

### I.2.3 Approximation de Hartree-Fock

Fock a montré qu'en exprimant la relation de Hartree (II.6) à l'aide d'un déterminant de Slater (II.7) on tient compte plus finement des interactions [4].

$$\psi(r_i) \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} \psi_1(r_1) & \psi_2(r_1) & \cdot & \cdot & \cdot & \psi_{N_e}(r_1) \\ \psi_1(r_2) & \psi_2(r_2) & \cdot & \cdot & \cdot & \psi_{N_e}(r_2) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \psi_1(r_{N_e}) & \psi_2(r_{N_e}) & \cdot & \cdot & \cdot & \psi_{N_e}(r_{N_e}) \end{pmatrix} \quad (\text{II.7})$$

L'approximation de Hartree-Fock conduit à exprimer l'énergie du système comme une fonctionnelle de sa fonction d'onde ( $\Psi$ ), pour la théorie de la densité fonctionnelle (DFT), l'énergie est une fonctionnelle de la densité électronique du système ( $\rho$ ) définie dans l'espace physique  $\mathbf{R}^3$ . Par la méthode DFT on peut résoudre l'équation de Schrödinger en ne faisant intervenir que de l'observable  $\rho$ , au lieu de l'espace de configuration à  $3N$  variable, dans lequel est définie la fonction d'onde (Hartree-Fock).

### I.3 Fondement de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

#### I.3.1 Principe

Chaque état possède une énergie totale d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur qui est représentée comme une fonctionnelle de densité électronique  $\rho$  de l'état fondamental :

$$E = E_{\min}(\rho) \quad (\text{II.8})$$

#### I.3.2 La densité électronique

Un électron ne peut être localiser en tant que particule individuelle, par contre sa probabilité de présence dans un élément de volume peut être estimée et correspond à la densité électronique ( $\rho$ ). Les électrons doivent donc être considérés dans leur aspect collectif (nuage

électronique) et la densité électronique permet de connaître la disposition spatiale des électrons.

### I.3.3 Premier théorème de Hohenberg et kohn

Le théorème de Hohenberg et Khon [5] montre que la densité électronique  $\rho(r)$  est la seule fonction nécessaire pour obtenir toutes les propriétés électroniques d'un système quelconque consiste à donner une justification théorique à l'idée à une densité électronique donnée correspond un potentiel extérieur unique. Le potentiel  $v_{ext}(r)$  est en effet déterminé, à une constante près, par la densité électronique  $\rho(r)$  qui fixe le nombre d'électrons, il s'ensuit que la densité électronique détermine également de façon unique la fonction d'onde et toutes les propriétés électroniques du système.

Dans ce cas on peut déterminer l'hamiltonien si les énergies cinétiques et d'interactions entre particules sont spécifiées :

$$\rho \Rightarrow \{N, Z_\alpha, R_\alpha\} \Rightarrow \hat{H} \Rightarrow \Psi_{fond} \Rightarrow E_{fond} \quad (\text{II.9})$$

L'énergie totale du système est donc une fonctionnelle de la densité,  $E = E[\rho(r)]$ , que nous pouvons réécrire en séparant les parties dépendantes du système ( $N, v_{ext}$ ) de celles qui ne le sont pas.

$$\begin{aligned} E[\rho(r)] &= T_{el}[\rho(r)] + V_{el-el}[\rho(r)] + V_{noy-el}[\rho(r)] \\ &= F_{HK}[\rho(r)] + \int \rho(r) V^{ext}(r) dr \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

Et

$$F_{HK}[\rho(r)] = T_{el}[\rho(r)] + V_{el-el}[\rho(r)] \quad (\text{II.11})$$

Les termes indépendants du système sont alors regroupés au sein d'une fonctionnelle dite de Hohenberg-Kohn ( $F_{HK}$ ). Cette nouvelle fonctionnelle contient  $T_{el-el}[\rho]$ , l'énergie cinétique électronique et  $V_{el-el}[\rho]$ , l'énergie potentielle due à l'interaction entre électrons. Les

expressions explicites de ces deux fonctionnelles ne sont pas connues, par contre nous pouvons extraire de  $V_{\text{él-él}}$  la partie classique, énergie de Hartree ( $V_{\text{él-él}}^{\text{cal}}[\rho]$ ).

$$V_{\text{él-él}}^{\text{cal}}[\rho(r)] = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (\text{II.12})$$

### I.3.4 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn

La densité de l'état fondamental est en principe suffisante pour obtenir toutes les propriétés intéressantes d'un système électronique. Mais, comment pouvons-nous être sur qu'une densité donnée est celle de l'état fondamental recherché ? Hohenberg et Kohn répondent à cette question à travers leur second théorème que nous pouvons énoncer de la façon suivante : l'énergie  $E[\rho_{\text{test}}]$ , associée à toute densité d'essai, satisfaisant les conditions limites nécessaires  $\rho_{\text{test}}(r) \geq 0$  et  $\int \rho_{\text{test}}(r) = N$  et associée à un potentiel extérieur  $V_{\text{ext}}$ , est supérieure ou égale à l'énergie associée à la densité électronique de l'état fondamental,  $E[\rho_{\text{fond}}]$ . D'après le premier théorème, une densité d'essai définit son propre hamiltonien et de même sa propre fonction d'onde d'essai. De là, nous pouvons avoir une correspondance entre le principe variationnel dans sa version fonction d'onde et dans sa version densité électronique telle que :

$$\langle \psi_{\text{test}} | \hat{H} | \psi_{\text{test}} \rangle = E[\rho_{\text{test}}] \geq E[\rho_{\text{fond}}] = \langle \psi_{\text{fond}} | \hat{H} | \psi_{\text{fond}} \rangle \quad (\text{II.13})$$

### I.3.5 L'approximation de densité Locale (LDA)

L'approximation de densité locale « LDA » [6], [7] repose sur l'hypothèse que les termes d'échange et corrélation ne dépendent que de la valeur locale de la densité  $\rho(r)$ . L'énergie d'échange-corrélation s'exprime de la manière suivante :

$$E_{xc}^{\text{LDA}} = \int \varepsilon_{xc}[\rho(r)] dr \quad (\text{II.14})$$

Où :

$\varepsilon[\rho(\mathbf{r})]$  : est la densité d'énergie d'échange corrélation par particule d'un gaz d'électrons uniforme. Elle est déterminée par des procédures de paramétrisation. Elle est divisée en deux contributions ; énergie d'échange et énergie de corrélation telle que :

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (\text{II.15})$$

### I.3.6 L'approximation du gradient généralisé (GGA)

L'approximation du gradient généralisé GGA [8-9] où l'énergie d'échange et de corrélation est en fonction de la densité d'électron et de son gradient :

$$E_{xc}^{GGA} = \int \varepsilon_{xc}^{GGA}(\rho, \nabla\rho) dr \quad (\text{II.16})$$

Où :

$\varepsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})]$  : est la densité d'énergie d'échange–corrélation. La difficulté réside dès lors dans la recherche d'expressions analytique de  $\varepsilon_{xc}^{GGA}$ . A cet effet, de nombreuses fonctionnelles ont été développées.

### I.4 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

La théorie de la fonctionnelle de la densité est une approche puissante pour le traitement du problème à plusieurs corps. Cependant, il est important de faire le choix convenable d'une base de fonctions d'onde pour la résolution des équations de Khon-Sham. Il existe plusieurs méthodes qui permettent de résoudre l'équation de Schrödinger. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'onde prises comme base. Parmi elle les méthodes basées sur une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) [10-11], permettent de traiter les métaux de transition. Les méthodes des ondes planes orthogonalisées (OPW) et leurs dérivées [12-13] applicables aux bandes de conduction de caractère " s-p " des métaux simples.

Les méthodes cellulaires du type ondes planes augmentées (APW) [14]. Les méthodes linéarisées mises au point par Andersen: Ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) et orbitales "muffin-tin" linéarisées (LMTO), permettent de gagner plusieurs ordres de grandeur dans les temps de calcul.

Pour un cristal, l'espace est divisé en deux régions : la première région est la sphère de Muffin-tin, et la deuxième, c'est l'espace restant qui représente la région interstitielle. La fonction de base de la méthode (FP-LAPW) possède des ondes planes dans la région interstitielle et harmoniques sphériques dans les sphères.

### **I.5 Le code Wien2k**

La méthode FP-LAPW a été implémentée dans le code WIEN, un ensemble de programmes élaborés par Blaha, Schwarz, et leurs collaborateurs. 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.

Les différents programmes indépendants que comprend le code WIEN2K peuvent être exécutés en utilisant soit une architecture séquentielle ou parallèle. La procédure de calcul passe par trois étapes:

**1-L'initiation:** 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.

**NN:** Un sous programme permettant de calculer les distances entre les plus proches voisins et les positions équivalentes (non chevauchement des sphères) ainsi que la détermination du rayon atomique de la sphère.

**LSTART:** Il permet de générer les densités atomiques; il détermine aussi 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 spéciaux (points K) dans la zone de Brillouin.

**DSTART:** 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-consistent): Dans cette étape, 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:** Il génère le potentiel de Poisson pour le calcul de la densité.

**LAPW1:** Il permet de calculer les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

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

**LCORE:** Il calcule les états et les densités de cœur.

**MIXER:** Il effectue le mélange des densités d'entrée et de sortie (de départ, de valence et du cœur).

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

## I.6 Conclusion

J'ai présenté dans ce chapitre la méthodologie qui me 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. En ce qui me concerne, la mise en œuvre est faite à l'aide du



code de calcul wien2k. La DFT nécessite un certain nombre d'approximations pour la rendre pratique dans les simulations atomistiques. Certaines sont peu contrôlables durant les calculs comme le maillage de la première zone de Brillouin ou la taille de la base d'onde.

## REFERENCES

- [1] P. Kireev. "La physique des semi-conducteurs". Edition MIR Mouscou.
- [2] H. Benaïssa. " Etude des propriétés structurales électroniques de l'alliage  $\text{InN}_x\text{As}_{1-x}$ ".  
2007. Thèse de magistère
- [3] N. Hout-Saidi "Propriétés structurales et électronique des composés binaires Ti-V par la méthode FP-LAPW". 2008. Thèse de doctorat.
- [4] V.A. Fock, Z.Phys, 15 126, (1930).
- [5] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 867, (1964)
- [6] W. Kohn, phys.Rev.A, 34, 737, (1986).
- [7] W.E. Pickett, "pseudo-potential methods in condensed matter applications", North-Holland-Amsterdam 1989.
- [8] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson., M. R. Pederson., D. J. Singh. and C. Fiolhais. Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [9] J. P. Perdew, S. Burk and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Let. 77, 3865 (1996).
- [10] M. Côté, O. Zakharov, A. Rubio, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 55, 13025 (1997).
- [11] Y. Al-Douri, H. Abid, H. Aourag Physica B 322, 179 (2002).
- [12] M.L. Cohen, Phys. Rev. B 32, 7988 (1985).
- [13] M.B. Kanoun, W. Sekkal, H. Aourag. Physics Letters. A 275, 113 (2001).
- [14] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz. WIEN2k, An Augmented PlaneWave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties User's Guide, 2001.

---

# Chapitre II

## Résultats et discussions

### II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les différents résultats issus de nos calculs la stabilité structurale et des propriétés électroniques et magnétiques du composé RaBi. La méthode de premiers principes dans l'approximation de gradient généralisé (GGA-PBE) [3] et l'approche de Becke-Johnson modifiée (mBJ-GGA-PBE) [5] pour déterminer l'énergie d'échange et de corrélation ont été utilisées pour étudier les propriétés structurales, électronique et élastique, du composé RaBi dans différentes phases (NaCl, CsCl, ZB, WZ, NiAs). Nous avons trouvé que la phase NaCl est la phase la plus stable.

La phase ferromagnétique est favorisée énergétiquement par rapport aux phases non magnétiques. Les propriétés mécaniques calculées pour les phases NaCl, ZB et WZ ont montré qu'elles sont mécaniquement stables. À partir de la structure de bande électronique et de la densité d'états, le composé RaBi montre un comportement demi-métallique. Le caractère demi-métallique et magnétique trouvé dans le composé RaBi est attribué à la présence d'orbitales  $2p$  polarisée en spin de l'atome du Bi. Nous avons trouvé que le composé RaBi dans les phases ZB et WZ est un ferromagnétique demi-métallique avec un moment magnétique de  $1 \mu\text{B}$  par unité de formule et des intervalles demi-métallique de  $0,18 \text{ eV}$  ( $0,33 \text{ eV}$ ) et  $0,16 \text{ eV}$  ( $0,40 \text{ eV}$ ) dans le GGA-PBE (mBJ-GGA-PBE) pour les phases WZ et ZB respectivement.

Dans ce travail, les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) [2] implémentée dans le code WIEN2K [1]. Pour le traitement du potentiel d'échange et corrélation, l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE) telle que développés par Perdew *et al.* en 2008 (qu'on note généralement PBE)

[3] a été utilisée. Cependant pour les propriétés électroniques, en plus de l'approximation citée, celle de mBJ-GGA-PBE qui est une combinaison de la partie du potentiel d'échange de TB-mBJ [4] et la partie du potentiel de corrélation de GGA-PBE [3] a été également appliquée.

Dans ce travail, on a utilisé cette nouvelle approche pour traiter le potentiel d'échange et de corrélation, comme celle de Tran Blaha modifiée [5] de la partie d'échange de Becke-Johnson (TBmBJ) [4], qui est introduite récemment. C'est une alternative pour la méthode GW ou la fonctionnelle hybride, et qui peut atteindre une précision comparable.

## **II.2 Détails de calcul**

Dans ce travail, les calculs ont été effectués en utilisant le code WIEN2k [1] qui est une application directe de la méthode FP-LAPW [2]. Cette méthode est basée sur des ondes planes augmentées avec linéarisation, associées avec des orbitales locales, pour permettre le calcul des structures de bandes électroniques, des moments magnétiques, des densités d'états et des densités de charge d'un cristal périodique en utilisant comme point de départ le réseau de Bravais ainsi que le groupe de symétrie spatial. La maille est divisée en deux régions; la région représentée par des sphères atomiques (dites sphères muffin-tin) centrées sur les noyaux, et la région interstitielle située entre les sphères. Dans les sphères muffin-tin la fonction d'onde est remplacée par une fonction atomique, alors que dans les interstices, elle est décrite par des ondes planes. D'un point de vue physique, ceci veut dire que tous les électrons (du cœur et de valence) sont pris en compte dans le calcul et qu'on ne peut pas faire d'approximation sur le potentiel autour des noyaux. Il s'agit donc d'une méthode dite «tous électrons» et à «potentiel total», et c'est pour cette raison que cette approche est l'une des méthodes les plus exactes disponibles actuellement. Les fonctions de base, les densités électroniques et les potentiels sont développés en combinaison d'harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères non chevauchées entourant les sites atomiques jusqu'à  $l=10$ , et en série

de Fourier dans la région interstitielle avec un rayon de coupure  $R_{MT} \times K_{MAX} = 8$ . ( $R_{MT} \times K_{MAX}$  détermine les fonctions de base ou la taille de la matrice avec  $R_{MT}$  le plus petit rayon muffin-tin et  $K_{MAX}$  la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres).

L'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE) [3] et l'approche de Becke-Johnson modifiée (mBJ-GGA-PBE) [5] ont été utilisés pour le traitement du potentiel d'échange et corrélation. Les configurations électroniques atomiques utilisées dans cette étude sont Ra: [Rn]  $7s^2$  et Bi : [Xe]  $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$ . La zone de Brillouin a été échantillonnée suivant le schéma de Monkhorst *et* Pack, et pour notre composé, nous avons utilisé un ensemble de points  $k$  dans la zone de Brillouin irréductible (IBZ) de  $11 \times 11 \times 11$  pour les phases cubiques (CsCl, NaCl et ZB),  $10 \times 10 \times 13$  et  $9 \times 10 \times 14$  pour les phases NiAs et WZ, respectivement.

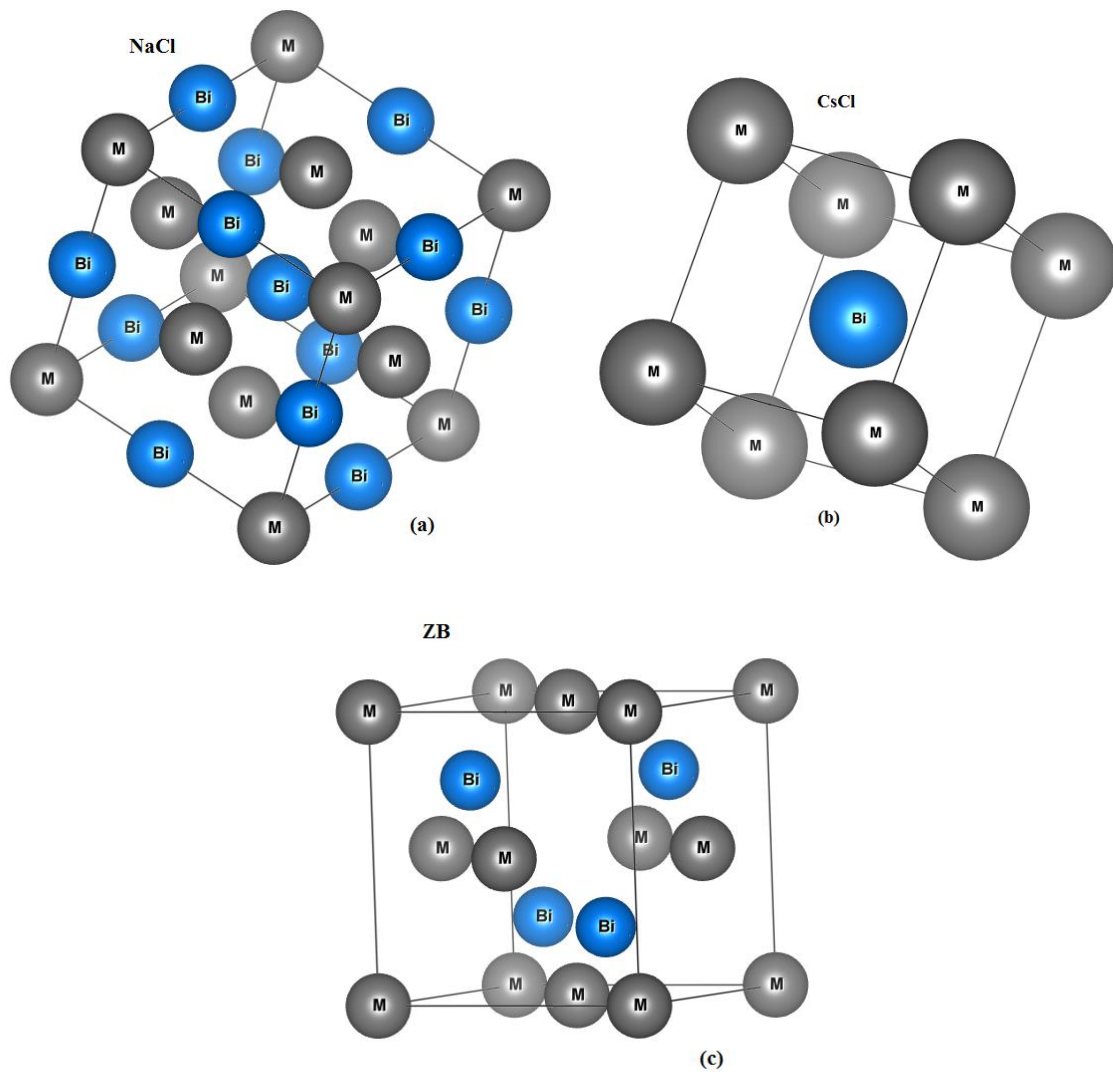
Nous avons considéré que les calculs auto-cohérents sont convergés lorsque l'énergie totale est stable à 0.01 mRy. Les rayons muffin-tin (MT) de 2.00 et 1.95 bohr pour Mg et N, respectivement, ont été adoptés. La densité d'états totale (DOS) a été obtenue en utilisant la méthode tétraédrique modifiée avec un échantillonnage dense de  $17 \times 17 \times 17$  points  $k$  pour les deux phases NaCl et ZB.

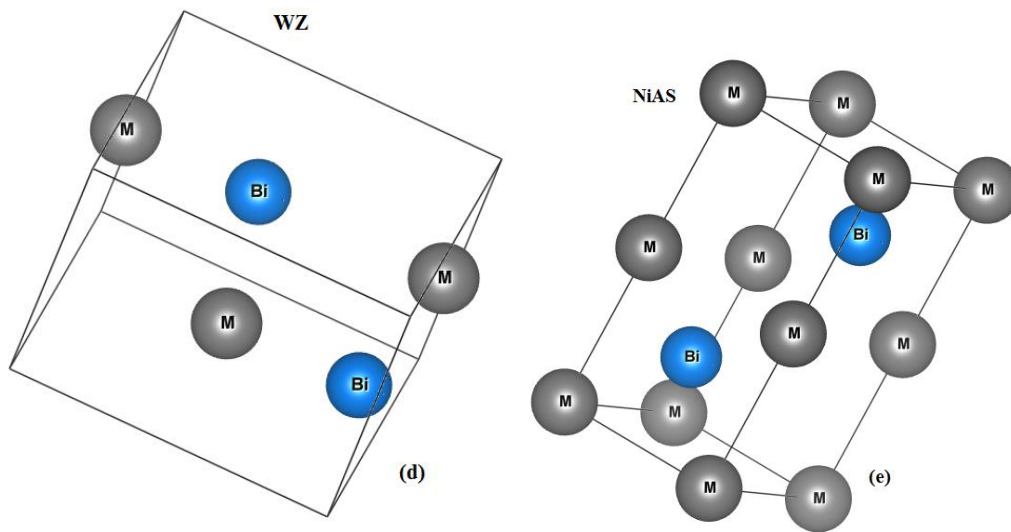
**Tableau II.1:** Le groupe d'espace et les coordonnées Wyckoff des différentes structures cristallines utilisées dans notre calcul : CsCl, NaCl, ZB, NiAs, WZ

	N°	Groupe d'espace	cation	Anion
<b>CsCl (B2)</b>	221	Pm3m	0, 0, 0	1/2, 1/2, 1/2
<b>NaCl (B1)</b>	225	Fm3m	0, 0, 0	1/2, 1/2, 1/2
<b>Zb (B3)</b>	216	F43m	0, 0, 0	1/4, 1/4, 1/4
<b>NiAs (B81)</b>	194	<i>P63/mmc</i>	0, 0, 0	1/3, 2/3, 1/4
<b>Wz (B4)</b>	186	<i>P63mc</i>	1/3, 2/3, 0	2/3, 1/3, $u$

Les différentes phases cristallines candidates CsCl, NaCl, zinc-blende (ZB), NiAs et wurtzite (WZ) utilisées dans nos calculs dans l'étude de la stabilité structurale du composé RaBi sont reporté dans le Tableau II.1 (voir Fig. II.1).

Nos résultats sont présentés dans ce qui suit et nous nous sommes concentrés sur les détails relatifs à l'évaluation des paramètres d'équilibre, des moments magnétiques et de la structure électronique dans le but d'extraire les propriétés physiques de ce matériau.





**Figure II.1:** Représentation des structures utilisées pour le binaires RaBi

Pour l'étude des propriétés structurales à l'équilibre, il est nécessaire dans un premier temps d'effectuer un calcul auto-cohérent de l'énergie totale (calcul self-consistent) et ceci pour plusieurs valeurs du paramètre de maille (valeurs voisines de la valeur expérimentale).

La procédure utilisée pour la détermination des propriétés structurales au voisinage de l'équilibre, consiste à évaluer l'énergie totale du système pour différentes valeurs de volume et ensuite l'optimisation des paramètres internes pour la structure spinelle normale, et différentes valeurs de volume, le rapport  $c/a$ , et ensuite l'optimisation des paramètres internes pour la structure spinelle inverse. La seconde étape consiste à déterminer les données structurales, à savoir le paramètre du réseau de l'équilibre  $a$ , le module de compressibilité  $B$  et sa dérivée  $B'$ ; par ajustement de l'énergie totale à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [6] donnée par:

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

Où  $E$ ,  $E_0$ ,  $V_0$ ,  $V$ ,  $B$  et  $B'$  sont respectivement l'énergie totale, l'énergie de l'état fondamental, le volume d'équilibre à l'état fondamental, le volume d'équilibre, le module de compression (rigidité) et la dérivée du module de compressibilité par rapport à la pression.

La constante du réseau à l'équilibre est donnée par le minimum de la courbe  $E_{tot}(a)$

Le module de compression est évalué au minimum de la courbe  $E(V)$  par la relation:

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{II.2})$$

Et la dérivée du module de compression  $B'$  est déterminée à partir de l'équation:

$$E(V) = E_0 + \left[ \frac{B}{B'(B'-1)} \right] \times \left[ V \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{II.3})$$

### II.3 Les propriétés structurales du composé RaBi

Les propriétés structurales du composé RaBi ont été présentées dans la figure II.2 et Tableau II.2. Nous avons calculé l'énergie totale en fonction du volume de composé RaBi dans les différentes phases (NaCl, CsCl, ZB, WZ et NiAs) pour les configurations de d'état fondamental ferromagnétique (FM) et non magnétique (NM).

**Tableau II.2** Valeurs des calculs ferromagnétique, non ferromagnétique et anti ferromagnétique en utilisant GGA-PBE du paramètre de réseau d'équilibre  $a$  (Å), module de compressibilité  $B$  (GPa), sa dérivée ( $B'$ ), et la différence d'énergie entre les états ferromagnétique et non magnétique  $\Delta E = E_{\text{FM}} - E_{\text{NM}}$  (meV), énergie de cohésion  $E_c$  (Ry) et l'énergie de formation  $E_f$  (Ry)

<i>RaBi</i>		$a$ (Å)	$c/a$	$u$	$B$ (GPa)	$B'$	$ \Delta E_{\text{FM-NM}} $ (meV)	$E_f$ (Ry)	$E_c$ (Ry)
<b>ZB</b>	FM	8.25			13	4.05	0	-0.28	-1.02
	NM	8.19			14	4.04			
<b>NaCl</b>	FM	7.41			23	4.03	0	-0.22	-1.03
	NM	7.41			23	4.20			
<b>CsCl</b>	FM	4.44			27	4.16	0	-0.32	-1.12
	NM	4.44			27	4.11			
<b>NiAs</b>	FM	4.82	2.123		24	4.28	0	-0.25	-1.15
	NM	4.82	2.123		24	4.23			
<b>WZ</b>	FM	5.90	1.576	0.389	38	4.03	109	-0.23	-1.09
	NM	5.85	1.579	0.384	38	4.04			



Les propriétés de l'état fondamental du composé RaBi dans les différentes phases et les deux configurations magnétiques (FM et NM) ont été évaluées en ajustant les valeurs calculées avec l'équation d'états de Murnaghan [6]. Comme le montre la figure II.2, la phase CsCl, qui a la configuration de l'état fondamental FM, est la phase la plus stable. Les calculs avec et sans polarisation de spins des paramètres de réseau, du module de compressibilité ( $B$  en GPa), et sa première dérivés par rapport à la pression ( $B'$ ), pour le composé RaBi dans les différentes phases sont énumérés dans le Tableau II.2 ainsi que d'autres résultats théoriques disponibles.

Nous avons également calculé l'énergie de cohésion du composé RaBi, qui est la différence entre l'énergie totale par atome du composé RaBi et les énergies totales des atomes libres Ra et Bi.

L'énergie totale utilisée a été minimisée par rapport à la configuration électronique et de spins en utilisant les calculs spin-polarisés. L'énergie de cohésion par atome  $E_{coh}$  du composé RaBi dans les différentes phases a été calculée en utilisant la relation suivante:

$$E_c^{RaBi} = E_{tot}^{RaBi} - (E_{Ra} + E_{Bi}) \quad (II.4)$$

Où  $E_{tot}^{RaBi}$  est l'énergie totale de composé RaBi, et  $E_{Ra}$  et  $E_{Bi}$  sont les énergies totales des atomes isolées.

Le composé RaBi sous pression a de nombreuses phases avec une liaison qualitativement différente qui, néanmoins, a des énergies de cohésions très similaires. Les différences d'énergie de cohésion entre les phases considérées pour le composé RaBi sont remarquablement petites. L'énergie de cohésion qui représente la quantité d'énergie nécessaire pour décomposer le composé en atomes isolés fournit une indication de la force de la liaison.

Les valeurs négatives de  $E_c$  pour le composé RaBi indique que notre composé devrait être stable en raison de la haute énergie des liaisons chimiques. Ainsi, il peut être synthétisé expérimentalement.

D'un autre côté, une autre mesure de la stabilité relative est l'énergie de formation  $E_f$ . Nous avons évalué l'énergie de formation du composé RaBi dans les différentes phases en utilisant l'équation ci-dessous:

$$E_{RaBi}^{form} = E_{tot}^{RaBi} - (E_{Ra}^{bulk} + E_{Bi}^{bulk}) \quad (II.5)$$

où  $E_{tot}^{RaBi}$  l'énergie totale d'équilibre du composé RaBi, et  $E_{Ra}^{bulk}$  et  $E_{Bi}^{bulk}$  sont les énergies de volume calculées dans leurs états standard.

Les énergies de formation calculées pour tous les composés sont répertoriées dans le tableau II.2, les résultats illustrent que tous notre composé est susceptible de se former et son énergie de formation négative indique sa stabilité thermodynamique.

La figure II.2 illustre la variation de l'énergie totale en fonction du volume obtenue pour les configurations magnétique (spin polarisée SP) et non magnétique (non spin polarisé NSP) pour les cinq phases structurales: NaCl (B1), CsCl (B2), ZB (B3), WZ (B4), et NiAs (B8), avec l'approximation GGA-PBE. Nous obtenons le comportement habituel dû au potentiel XC.

Nous remarquons que la structure CsCl possède la plus faible énergie totale parmi les quatres autres structures, elle est donc prise comme étant la structure de l'état fondamental. On peut remarquer aussi que le composé RaBi dans le phase WZ (B4) est ferromagnétique, alors que dans NaCl (B1), CsCl (B2), ZB et NiAs (B8) il présente des structures non magnétiques.

Nous reportons aux tableaux II.2 un récapitulatif des différentes valeurs calculées avec et sans spin-polarisé pour les cinq phases structurales zinc blende (ZB), NiAs, Wurtzite (WZ), NaCl et CsCl du paramètre de réseau d'équilibre ( $a$  et  $c/a$ ), du paramètre interne  $u$ , du module de compressibilité ainsi que de sa dérivée par rapport à la pression, ce sont des quantités extraites de l'équation d'état des systèmes étudiés.

Nous notons aussi que pour RaBi dans les structures NaCl, NiAs, ZB et CsCl les paramètres du réseau pour la phase SP sont égaux à ceux pour la phase NSP. Le composé dans ces structures ne présente aucun état du ferromagnétisme.

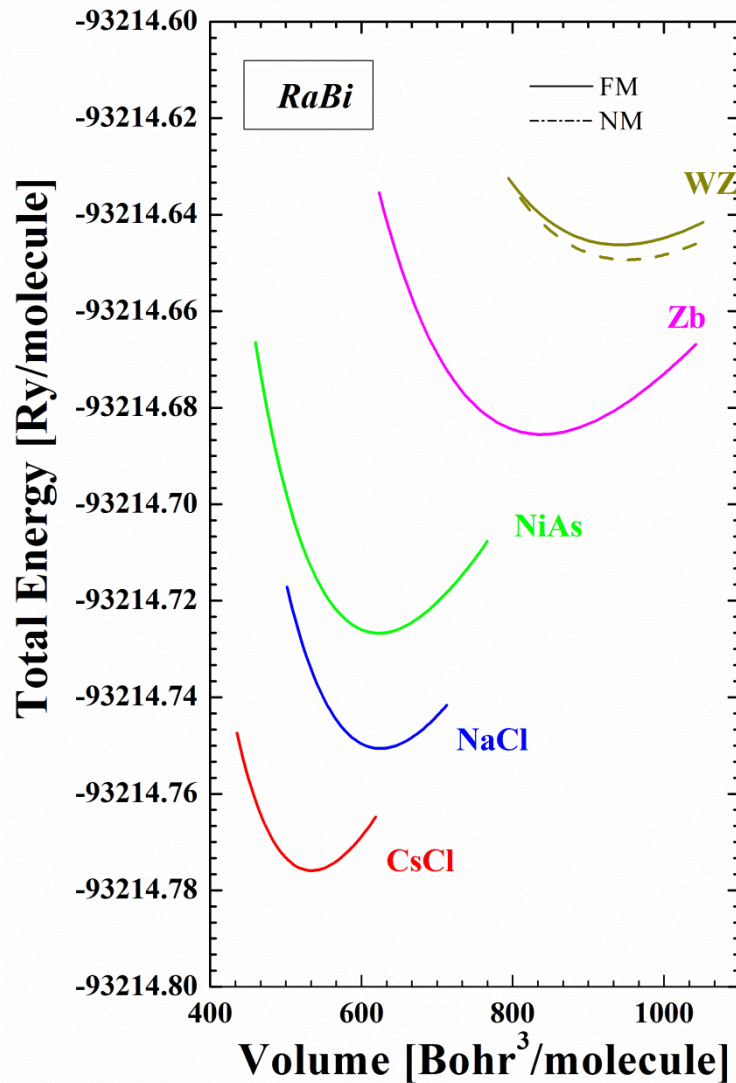
Nous avons constaté que le RaBi est ferromagnétique pour la structure Wurtzite (WZ) dans le cas du calcul spin polarisé.

En conclusion, RaBi peut présenter des propriétés ferromagnétiques, malgré l'absence des éléments magnétiques pour la structure Wurtzite (WZ).

Du fait de l'intérêt technologique de la structure WZ, on va étudier les propriétés électroniques, et magnétiques du composé RaBi dans cette structure et examiner l'influence du paramètre réseau  $a$  sur les propriétés magnétiques.

On retrouve le comportement habituel de la surestimation du paramètre du réseau et de la sous-estimation du paramètre de compressibilité. Nos résultats ont donc une cohérence interne. D'autre part, les géométries prédites par nos calculs FP-LAPW sont raisonnablement proches des valeurs prédites par d'autres calculs.

En examinant les tableaux II.2 il est clair que la différence d'énergie totale entre les états non et la différence d'énergie entre les états ferromagnétique et non magnétique  $\Delta E = E_{\text{FM}} - E_{\text{NM}}$  (meV), est positive pour la structure WZ, donc ce composé est stable dans la phase ferromagnétique, alors que  $\Delta E = 0$  pour les structures ZB, NaCl, NiAs, et CsCl.



**Figure II.2** Optimisation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'approximation GGA-PBE.

#### II.4 Propriétés élastiques

Dans les structures idéales, le matériau est stable mais quand il est soumis à des contraintes extérieures comme la température ou la pression, il change complètement de phase. Notre rôle est de vérifier que notre structure est la plus stable.

L'étude des propriétés élastiques des solides est l'outil indispensable pour fournir des informations précieuses sur la stabilité structurale et les propriétés mécaniques des matériaux, selon des critères bien définis. Le comportement élastique des matériaux est généralement décrit par les modèles basés sur une loi de comportement élastique linéaire, dite loi de Hooke.

Le calcul des constantes élastiques pour notre alliage est élaboré récemment par la méthode de Thomas Charpin implémentée dans le code WIEN2k. Dans le cas d'un cristal cubique, le nombre de modules d'élasticité peut être réduit à trois constantes indépendantes non nulles  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , suite à certaines considérations de symétrie, leur détermination nécessite la disposition des trois équations à résoudre, qui sont générées par l'application de trois types différents de déformation. Le calcul des constantes élastiques à partir de l'énergie totale repose sur la méthode de M. Mehl, qui consiste à imposer la conservation du volume de l'échantillon sous l'effet de la pression [7].

Les constantes élastiques  $C_{ij}$  d'un système cubique doivent satisfaire les critères de stabilité de Born suivants [13] :

$$\begin{cases} C_{44} \geq 0 \\ C_{11} - C_{12} \geq 0 \\ C_{11} + 2C_{12} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

Dans ce travail, nous avons utilisé le code runwien [8] pour déterminer les constantes élastiques du RaBi.

Les valeurs obtenues pour les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  de notre alliage sont listées dans le Tableau II.3. D'après les résultats précédents, et les critères de stabilité de Mehl, on remarque que le composé étudié est satisfaisant, tous les critères de la stabilité mécanique sont vérifiés, donc il est mécaniquement stable.

Le pionnier Robert Hooke (1635–1703) est le premier ayant fait des études sur le domaine des déformations élastiques où les solides ont la possibilité de revenir à leur état préalable sans dommage résiduel et restreint à des déformations dues à des contraintes limitées, alors qu'au-delà de ce domaine s'étend le domaine des déformations plastiques qui lui, est irréversible.

La connaissance des propriétés mécaniques d'un composé permet d'estimer et d'évaluer sa stabilité mécanique et de bien cerner son utilité. Le module de Young  $E$  est exprimé par la relation suivante :

$$E = \frac{9BG}{3G+B} \quad (\text{II.7})$$

B : module de compressibilité, G : le module de cisaillement.

Pour des cristaux cubiques, le module de cisaillement est lié aux constants élastiques selon l'approximation de Voigt- Reuss- Hill [9] par les relations suivantes :

$$G_V = \frac{C_{11}-C_{12}+3C_{44}}{5} \quad (\text{II.8})$$

$$G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \quad (\text{II.9})$$

$$G_H = \frac{G_R+G_V}{2} \quad (\text{II.10})$$

Où  $G_V$  est le module de cisaillement de Voigt correspondant à la limite supérieure des valeurs G et  $G_R$  est le module de cisaillement de Reuss pour les cristaux cubiques correspondants aux valeurs plus faibles.

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

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (\text{II.11})$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (\text{II.12})$$

$\nu$  : le coefficient de Poisson qui permet de caractériser la traction du solide perpendiculairement à la direction de l'effort appliqué.

Le comportement ductilité ou fragilité de ces matériaux peut être prédit. Selon le critère de Pugh [10, 11], si le rapport B/G est inférieur à 1.75 le matériau est fragile par contre s'il est supérieur à cette valeur le matériau est ductile.

Vu que le RaBi ayant un module d'élasticité E élevé, ce dernier subira une plus faible déformation avec module de cisaillement et un module de Young plus grand. Du point de vu de la ductilité et la fragilité, le rapport B/G est supérieur à la valeur critique 1.75 qui sépare le comportement ductile/fragile, ce qui classifie notre matériau comme un matériau ductile.

Ce matériau possède un module de compressibilité plus élevé, ce qui implique que le matériau étudié est difficile à briser. On peut expliquer ce résultat par une faible distance interatomique qui entraîne une grande cohésion du cristal. Pour un cristal isotopique  $A$  est égal à 1, mais quand il existe une autre valeur supérieure ou inférieure à 1 ça signifie qu'il s'agit d'un cristal anisotrope [12], concernant notre composé, nous remarquons que le coefficient d'anisotropie a dépassé l'unité, ce qui indique un caractère anisotropique. La valeur, du coefficient de Poisson sont inférieures à 0.5 (la valeur maximale de  $\nu$ ), indiquant que le composé RaBi est parfaitement compressible. Les résultats obtenus sont comparés avec d'autres études disponibles. En général, les valeurs obtenues sont proches à ces dernières.

**Tableau II.3** les constantes et les paramètres élastique

	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$B_V$	$B_R$	$B_H$	$G_V$	$G_R$	$G_H$	$E$	$\nu$	$A$	$B/G$
<b>RaBi</b>	90.61	12.07	10.33	38.25	38.25	38.25	18.7	7.66	13.18	35.47	0.34	1.12	2.90

A ce jour, et à notre connaissance il n'existe pas de données expérimentales ni théoriques en littérature pour pouvoir les comparer avec nos résultats. Donc, nos résultats peuvent être considérés comme une prédiction pour ce composé.

## II.5 Propriétés magnétiques

Les moments magnétiques total  $M_{tot}$ , interstitiel  $M_{int}$  et atomiques du composé RaBi ont été calculés en utilisant l'approximation GGA ; les résultats obtenus sont rassemblés dans le tableau II.4.

Nous avons calculé le moment magnétique total et partiel aussi bien dans la région interstitielle que dans la région sphérique pour les composés RaBi, les résultats sont regroupés dans le Tableau II.4. Le moment magnétique total calculé est un entier, avec une valeur de  $2\mu_B$  (magnétrons de Bohr) par unité de formule pour RaBi (moment magnétique

total), ce qui est également une caractéristique typique des composés demi métalliques ferromagnétiques.

La principale contribution au moment magnétique total provient de l'atome Bi. La contribution de Ra est très faible comparé à Bi. Dans la méthode FP-LAPW, la région interstitielle n'est référée à aucun atome, par conséquent nous pouvons voir une faible contribution de cette région. Les résultats obtenus par les approximations GGA et GGA + mBJ sont très proches et ne sont donc pas affectés par les approches utilisées dans notre étude.

**Tableau II.4** Valeurs des moments magnétiques,  $\mu_{\text{Total}}$  ( $\mu_B$ /molécule), par atome  $\mu_{\text{Ra}}$ ,  $\mu_{\text{Bi}}$ , ( $\mu_B$ )

Matériau	Méthode	$\mu_{\text{inters}}$ ( $\mu_B$ )	$M_{\text{Ra}}(\mu_B)$	$M_{\text{Bi}}(\mu_B)$	$\mu_{\text{tot}}$ ( $\mu_B$ )
RaBi	GGA-PBE	0.09	0.03	0.32	2.00
	mBJ-GGA-PBE	0.11	0.04	0.33	2.00

## II.6 Propriétés électroniques

### II.6.a La structure de bande du composé RaBi

Les structures de bandes du composé RaBi calculées avec polarisation de spin dans les deux directions de spin majoritaires et minoritaires dans la phase WZ sont présentées dans la figure II.3, en utilisant les deux approches GGA-PBE et mBJ-GGA-PBE.

Nous avons remarqué que les structures de bandes du composé RaBi calculées par les deux approximations GGA-PBE et mBJ-GGA-PBE sont demi-métalliques, à cause du caractère métallique dans la direction des spins minoritaires, et l'apparition d'un gap fondamental et d'un gap demi-métallique (DM) dans la direction des spins majoritaires.

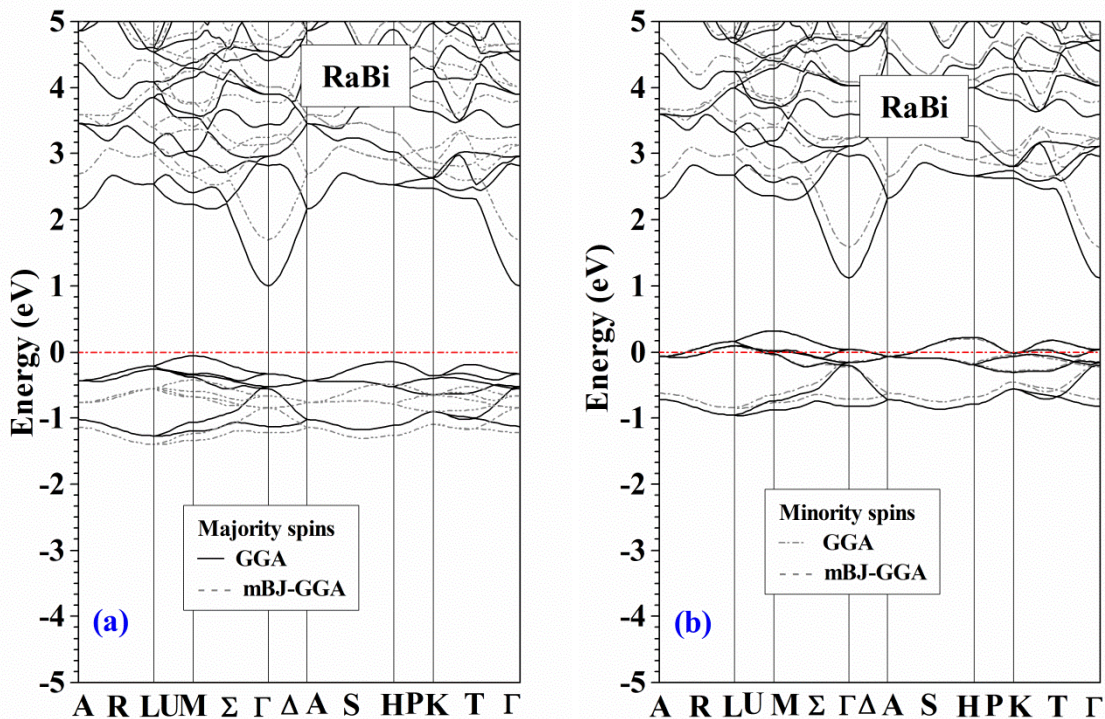
Cette conclusion confirme les résultats obtenus précédemment dans les propriétés structurales et magnétiques.



**Tableau II.5** Valeurs du gap  $E_g$  (eV) et du gap demi métallique (gap DM en eV) en utilisant l'approximation GGA-PBE et mBJ-GGA-PBE

Matériau	Méthode	gap DM (eV)	$E_g$ (eV)	Band gap
RaBi	GGA-PBE	0.18	1.30	indirect (M- $\Gamma$ )
	mBJ-GGA-PBE	0.33	2.05	indirect (M- $\Gamma$ )

Le Tableau II.5 montre les valeurs calculées du gap demi-métallique (gap DM) et du gap fondamental ( $E_g$ ) du composé RaBi dans la phase WZ. En comparant les résultats obtenus avec GGA-PBE et mBJ-GGA-PBE, nous avons observé qu'il y a une correction surprenante faite par l'approche mBJ-GGA-PBE. En effet, les valeurs du gap ont été trouvés plus grandes que celles obtenues avec GGA-PBE. La nature du gap dans la direction des spins majoritaires est indirecte dans la phase WZ avec le maximum de la bande de valence dans la direction M  $\square$  et le minimum de la bande de conduction au point  $\Gamma$   $\square$  comme indiqué dans le Tableau II.5.



**Figure II.3:** Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du RaBi (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.

La valeur du gap demi-métallique (DM) présentée dans le Tableau II.5 est déterminée comme la différence entre le maximum de bande de valence des états de spins majoritaires par rapport à l'énergie du niveau de Fermi. Nous avons observé que les valeurs des gaps DM calculés dans la phase WZ sont plus importantes en utilisant mBJ-GGAPBE que celles trouvées par l'approximation GGA-PBE. Ceci est attendu car la fonction mBJ-GGA-PBE corrige la valeur du gap.

### II.6.b La densité d'état du composé RaBi

Pour mieux comprendre la structure de bande, il est aussi intéressant de déterminer les densités d'états totales (DOS) et partielles (PDOS) afin de savoir quel type d'hybridation et quels états sont responsables du magnétisme dans ce composé magnétique. Le calcul de la densité d'états nécessite un grand nombre de points spéciaux (nous avons utilisé 5000 points spéciaux dans la zone de Brillouin totale (BZ)). A cet effet, nous allons présenter le calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle pour les spins majoritaires et minoritaires du composé RaBi dans la phase WZ.

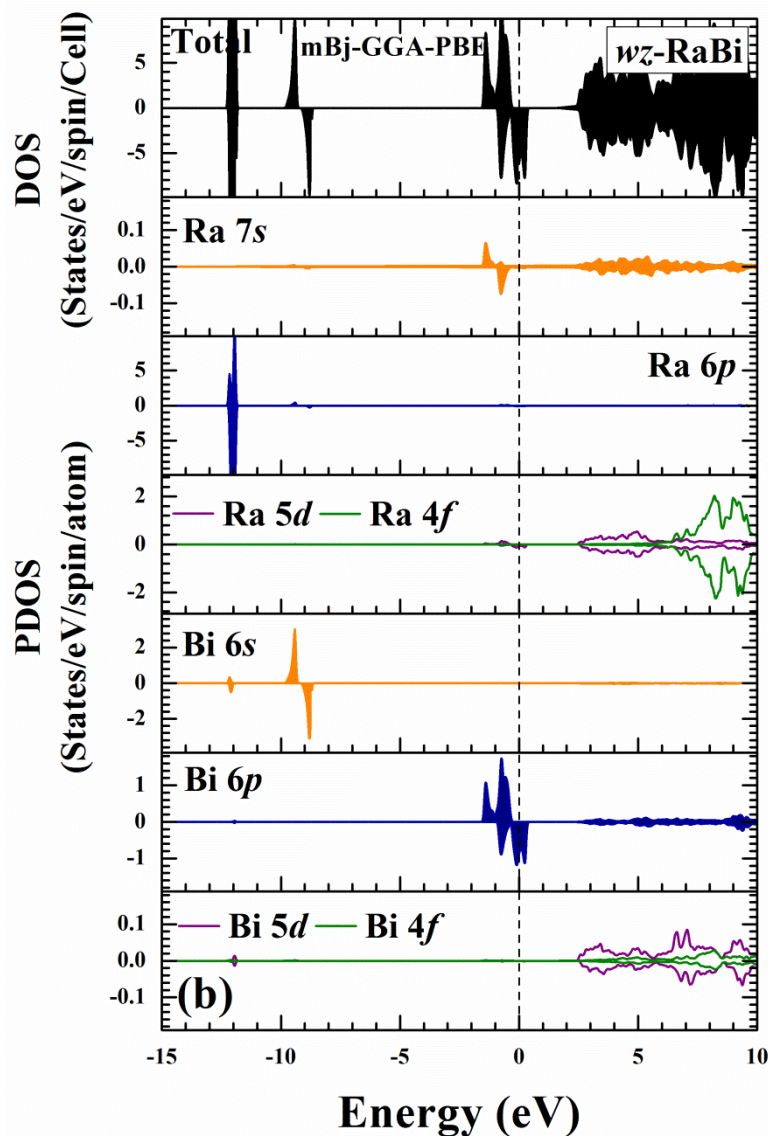
Pour mieux comprendre l'origine magnétisme, nous avons calculé les densités d'états totales (DOS) et partielles (PDOS) du composé RaBi en utilisant les deux approches GGA-PBE et mBJ-GGAPBE.

Les résultats sont présentés dans la figure II.4. D'après cette figure, nous avons remarqué qu'il existe une différence de population entre les spins majoritaires et les spins minoritaires au niveau de Fermi. Les zones bleues représentent, la contribution des orbitales  $p$  de l'atome Bi, tandis que la ligne noire représente la densité d'états totale (DOS). La densité d'états (DOS) confirme les conclusions obtenues précédemment, en utilisant les deux approximations. En utilisant les deux approches GGA-PBE et mBJ-GGA-PBE, le composé RaBi a été trouvé un demi-métal.

En comparant la densité d'états totale (DOS) dans les deux directions des spins majoritaires et minoritaires, nous avons observé que dans les deux approximations, il y a un décalage des pics au niveau de Fermi. Il faut noter, que ce décalage est plus grand en utilisant mBJ-GGA-PBE. Ces pics sont à l'origine formés par les états  $p$  de l'anion Bi. Ce résultat signifie que le magnétisme provient des orbitales  $p$  de l'atome Bi.

Le caractère demi-métallique DM du composé RaBi observé sur le profil la DOS similaire à celui trouvé dans les structures de bandes électroniques.

D'après la figure II.5, les états Bi  $p$  ont été trouvés responsables des propriétés demi-métalliques du composé RaBi. Ce sont ces états Bi  $p$  qui contribuent largement dans les densités d'états totales du composé RaBi autour et au niveau de Fermi dans la phase WZ.



**Figure II.4:** Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du RaBi. La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.

## II.7 Conclusion

Des calculs détaillés ont été effectués en utilisant l'approche (FP-APW + lo) avec l'approche GGA-PBE, et mBJ-GGA-PBE pour étudier les propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques du composé RaBi.

Le calcul de l'énergie totale en fonction du volume à l'aide de la GGA-PBE pour les trois configurations PM et FM nous permet de dire que notre matériau étudié dans ce mémoire est

ferromagnétiques (FM). Et d'après le calcul des propriétés élastiques nous avons trouvé que notre composé est mécaniquement stable, anisotrope et ductile.

Le calcul de la structure de bande a montré que notre composé présente un gap séparant les états anion et cation pour la polarisation spin-haut, tandis que pour la polarisation spin-bas, les bandes de valence et de conduction se recouvrent considérablement et il n'y a aucune bande interdite (gap) au niveau de Fermi.

## REFERENCES

- [1] D. Singh, "Plane waves, pseudopotential and the LAPW method. Boston, Dordrecht," ed: London: Kluwer Academic Publishers, 1994.
- [2] P. Blaha, "WIEN 2 k," An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, 2001.
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Perdew, burke, and ernzerhof reply," Physical Review Letters, vol. 80, p. 891, 1998.
- [4] A.D. Becke, E.R. Johnson, The Journal of Chemical Physics 124 (2006) 221101.
- [5] F. Tran, P. Blaha, Physical Review Letters 102 (2009) 226401.
- [6] F.D. Murnaghan, Proceedings of the National Academy of Sciences 30 (1944) 244-247.
- [7] J.F. Nye, Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices, Oxford University Press, Oxford, 1985.
- [8] H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganen, Thèse (2015).
- [9] A. BAHNES, Electronic, structural, magnetic, elastic and thermal properties of new quaternary Heusler alloys CoFeScP, 20èmes Journées Scientifiques et Pédagogiques (JSP'20), USTHB (2016).
- [10] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B. 59, 1758 (1999).
- [11] P. E. Blöchl, Phys. Rev. B. 50, 17953 (1994).
- [12] X. Wu, D. Vanderbilt, and D. R. Hamann, Phys. Rev. B. 72, 035105(2005).

## Conclusion Générale

Dans ce travail de recherche, nous avons présenté une étude purement théorique basée sur des calculs de premier-principes dans le but d'explorer le caractère ferromagnétique, et demi-métallique dans des matériaux qui ne contiennent pas des électrons  $d$  des éléments de métaux de transition ou des électrons  $f$  des éléments de terres rares, en particulier, ceux de la famille IIA–V qui contiennent seulement des électrons  $p$ , le cas de notre composé binaire RaBi.

A cet effet, nous avons choisi de travailler avec la méthode FP-LAPW dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité en tenant compte de la polarisation du spin pour étudier les propriétés structurales, magnétiques, mécaniques, et électroniques du composé RaBi, en utilisant deux types d'approximations pour l'énergie d'échange et de corrélation, telles que l'approximation de gradient généralisée (GGA-PBE) et l'approximation GGA-PBE modifiée en remplaçant le potentiel d'échange par celui de Becke-Johnson modifiée (mBJ-GGA-PBE).

Dans un premier temps, nous avons présenté une étude sur la stabilité structurale, et magnétique du composé RaBi dans les différentes phases (NaCl, CsCl, ZB, WZ, NiAs) en adoptant les deux configurations de spin, non spin-polarisée

(NSP) et spin-polarisée (SP) pour chaque phase. Nous avons déterminé les paramètres de réseau, le module de compressibilité, sa dérivée et le moment magnétique total et par atomes pour chaque phase.

Les constantes élastiques  $C_{ij}$  du pour composé RaBi calculées dans la phase

ZB répondaient bien aux critères de stabilité élastique. Cela indique que le composé RaBi dans la phase considérée est mécaniquement stable et anisotrope. De plus, nous avons constaté que le composé RaBi est ductile selon les critères de Pugh.

D'après nos résultats, nous avons trouvé que le composé RaBi est un matériau ferromagnétique demi-métallique et présente un gap indirect  $M - \Gamma$  dans la direction des spins majoritaires dans la phase WZ. L'utilisation de l'approximation mBJ-GGA-PBE relativement à l'approximation GGA-PBE a provoquée un changement total de la structure électronique du

composé RaBi. Cette approximation a corrigée la valeur du gap fondamental et par conséquent la valeur du gap demi-métallique.