

Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique
Département de Physique.
Filière : Physique.

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES
Pour l'Obtention du Diplôme de Master en Physique.
Option : **Physique des matériaux.**

Présenté par :
ABBES Nassima

THEME :
**Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques
du composé Heusler Fe_2MnSn .**

Soutenu le : 21/06/2022

Devant le jury composé de :

MEGHOUFEL Zahira Faiza	MCA	Université de Mostaganem	Président
LABDELLI Abbas	MCB	Université de Mostaganem	Examineur
ABBASSA Hamza	MCA	Université de Mostaganem	Encadrant

Année Universitaire 2021-2022



Dédicaces



Je dédie ce modeste travail :

À mon premier soutien dans cette vie : mes chers parents

À ma deuxième maman : ma grand-mère adorée

À ma force dans ma vie : mes frères et mes sœurs

À ma merveilleuse famille

À tous mes amis les plus proches surtout Zohra, Soulaf et Maroua

À tous mes collègues de la promotion de master physique

À tous les physiciens

À tous ceux qui m'ont soutenu moralement de près ou de loin
et ont contribué à la réalisation de ce travail

Nsm...

Remerciements

Je remercie en premier lieu mon dieu le tout-puissant qui m'a éclairé le bon sentier et de m'avoir accordé la puissance, la volonté et la santé pour terminer l'achèvement de ce modeste travail qui a été réalisé à la Faculté des Sciences Exactes de l'Université de Mostaganem.

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

Je tiens à exprimer mes remerciements à **Mme F. Zahira MEGHOUFEL**, maître de conférence classe A, à l'université de Mostaganem, FSEI, d'avoir accepté de présider le jury.

Je remercie sincèrement **Mr Abbes LABDELLI**, maître de conférence classe B, de l'École supérieure d'agronomie de Mostaganem (ESAM), d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Mes sincères remerciements à **Mme L. Wassila RAHAL**, maître de conférence classe A, à l'université de Mostaganem, FSEI, pour sa gentillesse et ses précieux conseils tout au long de mes années universitaires, je suis vraiment reconnaissante qu'elle incarne le professeur idéal qui vous fait aimer et travailler dur dans n'importe quelle matière qu'il enseigne.

J'adresse mes vifs remerciements à mon frère **El Habib**, doctorant en physique et enseignant vacataire dans l'École supérieure d'agronomie de Mostaganem, pour sa disponibilité constante et ses précieux conseils et je voudrais aussi remercier doctorante **Imen BOUHAMOU** pour me soutenir et me motiver à réaliser ce travail.

Enfin, ces remerciements ne seraient pas complets sans mentionner mes parents et toute ma famille et mes amis qui par ses encouragements et leur assistance morale, qui m'a permis de faire ce mémoire dans les bonnes conditions.

Liste des abréviations

DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité (<i>Density functional theory</i>)
LDA	Approximation de la Densité Locale (<i>Local Density Approximation</i>)
GGA	Approximation du gradient généralisée (<i>Generalized gradient approximation</i>)
GGA-PBE	Approximation du Gradient Généralisé de Perdew , Burk et Ernzerhof
FA-LAPW	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total
NM	Non-magnétique (<i>Non-magnetic</i>)
FM	Ferrimagnétique (<i>Ferrimagnetic</i>)
E_f	Niveau de Fermi (<i>Fermi level</i>)
a	Paramètre de maille (Lattice parameter)
M	Le moment magnétique.
DOS	Densité d'états (<i>Density of States</i>)
TDOS/PDOS	Densité d'états totale / partielle (<i>Total / Partial density of states</i>)
P	Polarisation
B	Module de compressibilité (<i>Bulk modulus</i>)

Liste des figures :

<i>N°</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
I.1	Un tableau périodique montrant le type de comportement magnétique de chaque élément à température ambiante.	06
I.2	Diamagnétisme.	07
I.3	Paramagnétisme.	08
I.4	Ferromagnétisme.	10
I.5	Antiferromagnétisme.	11
I.6	Ferrimagnétisme.	11
II.1	Tableau périodique des éléments.	14
II.2	Structure cristalline de l'alliage Half Heusler.	15
II.3	structure cristalline de l'alliage Heusler (<i>Full-Heusler</i>).	16
II.4	Les différents types de désordre.	17
II.5	Structure cristalline d'Heusler quaternaire.	18
II.6	Illustration schématique de la densité des états.	20
II.7	Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.	22
II.8	les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.	23
III.1	Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β respectivement.	28
III.2	Organigramme d'un calcul auto-cohérent dans une méthode basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique DFT.	31
III.3	L'optimisation de l'énergie totale en fonction du volume pour les deux états (NM) et (FM).	34
III.4	Relation entre la position des bandes d'énergie et le niveau de Fermi qui donne le comportement électronique métallique, semi-conducteur, et isolant.	35
III.5	La structure de bande de l'alliage Fe_2MnSn .	36
III.6	La densité d'état totale et partielle du composé Fe_2MnSn .	37

Liste des tableaux :

<i>N°</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
II.1	Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type C1 _b .	15
III.1	Les valeurs des RMT pour chaque atome du composé Fe ₂ MnSn	32
III.2	Propriétés structurales : constante du réseau a (Å); module de compressibilité B (GPa) et sa première dérivée B'.	34
III.3	Le moment magnétique total et local (μ_B) des composés Fe ₂ MnSn.	38
III.4	Constantes élastiques C _{ij} en GPa de l'alliage Fe ₂ MnSn.	41
III.5	Les propriétés mécaniques des alliages Fe ₂ MnSn.	43

Table des matières :

	Introduction générale	
	Introduction générale	02
I.1	Chapitre I: Le magnétisme	
I.2	Introduction	05
I.2.1	Classification des comportements magnétiques	05
I.2.2	Le comportement diamagnétique	06
I.2.3	Le comportement paramagnétique	07
I.2.4	Le comportement ferromagnétique	09
I.2.5	Le comportement antiferromagnétique	10
	Le comportement ferrimagnétique	11
	Bibliographies	12
	Chapitre II: Les alliages d'Heusler	
II	Les alliages d'Heusler	14
II.1	Introduction	14
II.2	Structure cristalline	15
II.2.1	Les alliages demi-Heusler (Half-Heusler)	15
II.2.2	Les alliages Heusler (Full-Heusler)	16
II.2.3	Les alliages d'Heusler quaternaires	18
II.3	Demi-métallicité des alliages Heusler	19
II.4	Les applications	21
II.4.1	Magnétorésistance Géante (GMR)	21
II.4.2	Magnétorésistance Tunnel	22
II.5	Conclusion	23
	Bibliographies	24
	Chapitre III: Résultats et discussions	
III.1	Introduction	27
III.2	Introduction aux codes de calcul utilisés	27
III.2.1	Résolution des équations de Kohn-Sham (L'auto-cohérence dans les calculs)	30
III.3	Détail de calcul	32
III.4	Propriétés structurales	33
III.5	Propriétés électroniques	35
III.5.1	Structure de bande	35
III.5.2	La densité d'états (D.O.S)	36
III.6	Propriétés magnétiques	38
III.7	Propriétés élastiques et mécaniques	39
III.7.1	Propriétés élastiques et critères de stabilité	39
III.7.2	Propriétés mécaniques	41
	Bibliographies	45
	Conclusion générale et perspectives	
	Conclusion générale et perspectives	48

Introduction

Générale

Introduction générale :

La science des matériaux est un domaine vaste qui concerne la compréhension et l'application des propriétés de la matière, c'est pourquoi les chercheurs en science des matériaux se concentrent actuellement sur le comportement magnétique des agrégats de métaux de transition en raison de son grand espoir pour de futures applications technologiques.

Le magnétisme est une force de la nature produite par le déplacement de charges électriques. Parfois, ces mouvements sont microscopiques et à l'intérieur d'un matériau appelé aimants. Les aimants, ou les champs magnétiques créés par le déplacement de charges électriques, peuvent attirer ou repousser d'autres aimants et modifier le mouvement d'autres particules chargées. Certains matériaux, comme le fer, sont connus sous le nom d'aimants permanents, ce qui signifie qu'ils peuvent supporter un champ magnétique permanent. Ce sont les formes d'aimants les plus courantes rencontrées dans la vie de tous les jours. D'autres matériaux, tels que le fer, le cobalt et le nickel, peuvent recevoir un champ magnétique temporaire en les plaçant à l'intérieur d'un champ plus grand et plus puissant, mais ces matériaux finiront par perdre leur magnétisme. Les champs magnétiques sont générés par le mouvement des charges électriques, selon Hyper Physics. Les électrons ont tous une propriété mécanique quantique fondamentale du moment cinétique, connue sous le nom de "spin". À l'intérieur des atomes, la plupart des électrons ont tendance à former des paires dans lesquelles l'un d'eux est "spin up" et l'autre est "spin down", ou en d'autres termes leur moment cinétique pointe dans des directions opposées. Dans ce cas, les champs magnétiques créés par ces spins pointent dans des directions opposées, ils s'annulent donc.

Les alliages Heusler ont constitué un sujet de recherche important en raison de leur structure électronique unique, qui présente une demi-métallicité, et d'une grande variété de propriétés telles que les effets magnéto-caloriques, thermoélectriques et de mémoire de forme magnétique. Au fur et à mesure que le rendement de ces matériaux augmente et que les applications commerciales se rapprochent, les propriétés mécaniques de ces matériaux deviennent un facteur important tant pour leur traitement que pour leur utilisation finale.

Très peu d'études ont étudié expérimentalement les propriétés mécaniques, mais celles qui existent sont examinées dans le contexte de leur performance magnétique et de leur espace d'application, en mettant l'accent sur les propriétés élastiques, la dureté et la ductilité.

Une partie importante de la recherche sur les alliages Heusler est de nature théorique et beaucoup tentent de fournir une vue de base des propriétés élastiques et de distinguer entre les attentes de comportement ductile ou fragile. Alors que la facilité de générer des données par le biais de méthodes atomistiques permet une comparaison à grande échelle de divers alliages conceptuels, le manque de validation expérimentale peut conduire à des conclusions incorrectes concernant leur comportement mécanique. La déconnexion observée entre les quelques résultats expérimentaux disponibles et les nombreux résultats de modélisation souligne la nécessité de réaliser davantage de travaux expérimentaux dans ce domaine.

Notre travail est basé sur une étude *ab-initio* des propriétés du composé Heusler Fe_2MnSn et ceci est fait en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) avec la méthode FP-LAPW implémentée dans le code Wien2k. Ce mémoire est structuré en deux chapitres :

Le premier chapitre est dédié à la présentation de quelques rappels sur le magnétisme détaillé en plusieurs comportements magnétiques selon l'amplitude et de l'orientation des moments magnétiques de spin. Ensuite, une description sur les alliages Heusler en expliquant leurs types et leurs propriétés, puis comment ces matériaux sont appliqués à la spintronique.

Le deuxième chapitre est une partie consacré à la destination d'une introduction aux codes de calcul utilisés, et la présentation et discussion des principaux résultats obtenus tels que les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques et mécaniques respectivement de ces alliages.

Enfin, nous clôturons cette étude par une conclusion générale qui recouvrera les principaux résultats dégagés et les perspectives.

CHAPITRE I

Le Magnétisme

I.1. Introduction :

L'étude du magnétisme et des matériaux magnétiques suscite un intérêt croissant en raison de leurs applications dans divers domaines, et l'étude du magnétisme a toujours attiré l'attention de l'humanité, notamment après la découverte des phénomènes de dia-para- et ferro- magnétisme par Curie et la détermination du moment magnétique intrinsèque de l'électron par Dirac. Ils sont utilisés dans de nombreuses applications, y compris l'industrie lourde et la technologie de tous les jours.

En utilisant le magnétisme, on peut établir une force attractive ou répulsive entre deux objets, ou déplacer des charges électriques. Ces objets dits magnétisables sont capables de réagir au champ magnétique par une réaction d'orientation et/ou de déplacement dépendant de la force et de l'orientation. Cette force est générée par le champ magnétique et est produite par des charges ou des aimants en mouvement.

Généralement, une grandeur macroscopique appelée aimantation \vec{M} décrit les propriétés magnétiques d'un matériau, et est définie comme le moment magnétique total par unité de volume puisque la réponse des matériaux magnétiques à un champ magnétique \vec{H} est au cœur de leurs propriétés.

Ce chapitre présente une synthèse bibliographique généralisée où quelques notions de base sont discutées sur les différentes catégories de matériaux magnétiques, en particulier, comment ils réagissent aux champs magnétiques internes et leurs propriétés relatives aux différents champs. Ensuite, nous décrirons les alliages Heusler en expliquant leurs types et leurs propriétés, puis comment ces matériaux sont appliqués à la spintronique.

I.2. Classification des comportements magnétiques:

Le comportement magnétique peut être utilisé pour classer tous les matériaux en fonction du signe et de l'amplitude de la susceptibilité magnétique χ_m , cette approche est appelée classification phénoménologique des matériaux magnétiques et est généralement utilisée pour décrire les différents types de comportement magnétique des matériaux de sorte qu'il existe trois types principaux qui expliquent les propriétés magnétiques de la plupart des éléments du tableau périodique à température ambiante (voir la figure I.1) et

ils sont :diamagnétisme, paramagnétisme et ferromagnétisme mais il y a des cas où les trois catégories mentionnées ne correspondent pas pour cette raison, les gens reconnaissent généralement deux autres formes de magnétisme qui sont l'antiferromagnétisme et ferrimagnétisme. Dans ce chapitre, nous allons expliquer ces cinq types de comportement magnétique et ce qui

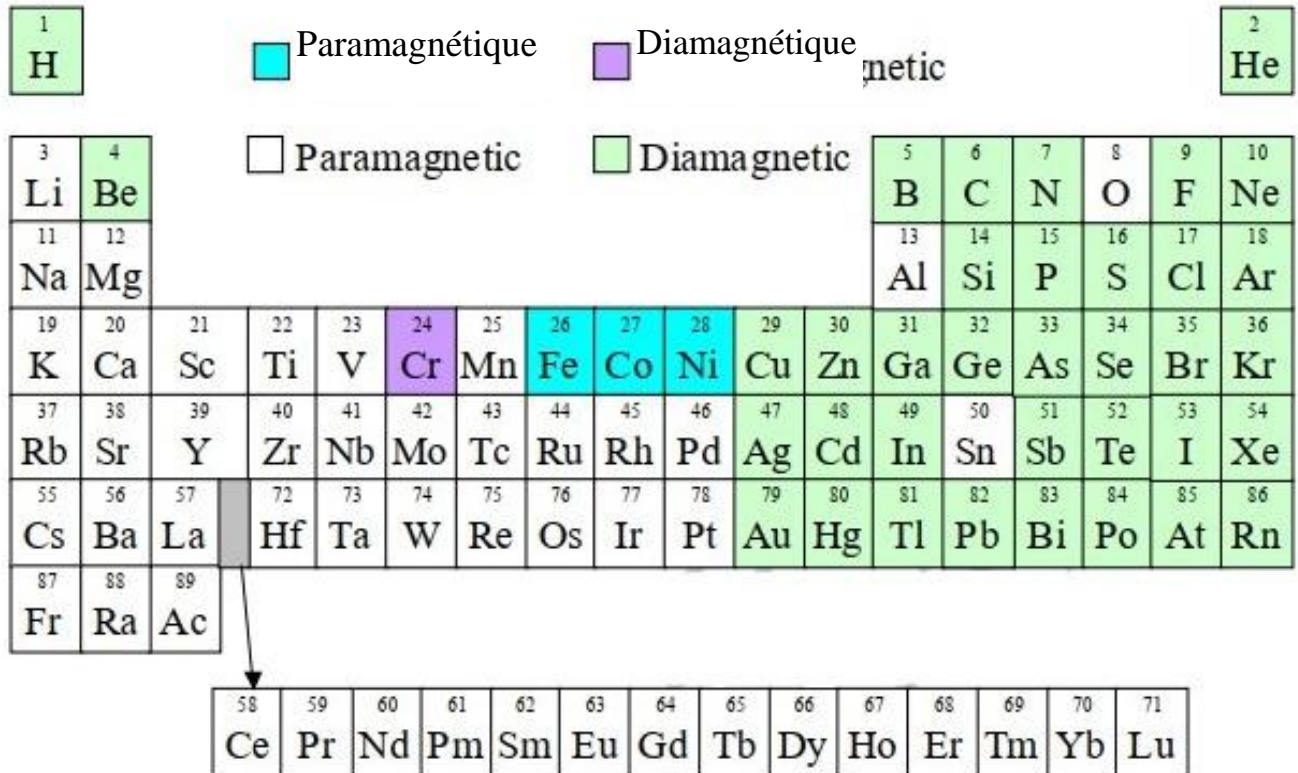


Figure I.1 : Un tableau périodique montrant le type du comportement magnétique de chaque élément à température ambiante.

I.2.1. Le comportement diamagnétique :

Le diamagnétisme est un effet de mécanique quantique qui se produit dans tous les matériaux contenant uniquement des atomes non magnétiques et elle est également causée par le ralentissement des électrons dans leurs orbites [1], mais ce phénomène est peu important et n'est visible que si les atomes ou molécules ne possèdent pas de moment magnétique individuel intrinsèque qui masquerait l'effet et il est souvent masqué par d'autres manifestations du magnétisme (paramagnétisme ou ferromagnétisme); quand c'est la seule contribution au magnétisme, le matériau est dit diamagnétique.

Les métaux diamagnétiques ont une susceptibilité très faible et négative aux champs magnétiques (environ -10^{-5}) [2], la majorité des éléments du tableau périodique y compris l'or, l'argent et le cuivre sont diamagnétiques.

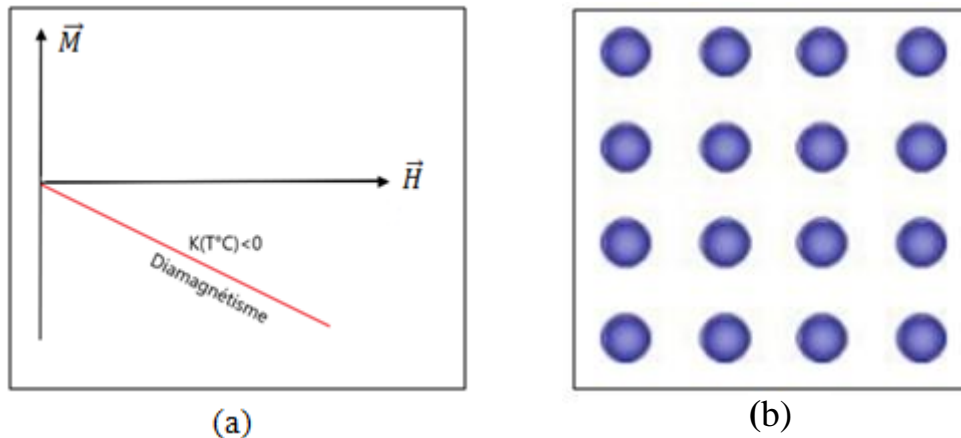


Figure I.2 :a) $M(H)$, b) Arrangement de spin dans un matériau diamagnétique.

Sous l'influence d'un champ appliqué (H), les électrons en rotation subissent une précession et ce mouvement (qui représente un type de courant électrique), produit une aimantation (M) dans le sens opposé à celui du courant appliqué domaine. La valeur de la susceptibilité est indépendante de la température.

I.2.2. Le comportement paramagnétique :

Le phénomène du paramagnétisme se produit lorsque certains atomes ou molécules sont intrinsèquement magnétiques, et ces moments existent même sans champ extérieur. Un champ nul, cependant, résulte de l'orientation aléatoire des moments magnétiques individuels, ce qui se traduit par un moment magnétique nul pour l'ensemble de particules.

Pour les matériaux avec des électrons localisés sans interaction, il est possible de comprendre le paramagnétisme en utilisant le modèle de Langevin, qui stipule que chaque atome a son moment magnétique spontané en réponse à l'agitation thermique qui augmentera avec l'augmentation de la température, il deviendra donc de plus en plus difficile d'aligner les moments magnétiques atomiques à mesure que la température augmente en conséquence, la susceptibilité diminuera. C'est ce qu'on appelle la loi Curie.

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (\text{I.1})$$

Où C est une constante matérielle appelée constante de Curie.

Les matériaux soumis à cette loi sont des matériaux dans lesquels les moments magnétiques sont déterminés en emplacements atomiques ou ioniques où il n'y a pas d'interaction entre les moments magnétiques adjacents.

Les métaux paramagnétiques ont une susceptibilité faible et positive aux champs magnétiques (environ $+10^{-5}$ à 10^{-3}).

Pour certains matériaux solides, chaque atome possède un moment dipolaire permanent par la vertu de l'annulation incomplète du spin électronique et/ou des moments magnétiques orbitaux.

En l'absence du champ magnétique externe, les orientations de ces moments magnétiques atomiques sont aléatoires, de sorte qu'un morceau de matériau ne possède aucune aimantation macroscopique nette. Ces dipôles atomiques sont libres de tourner.

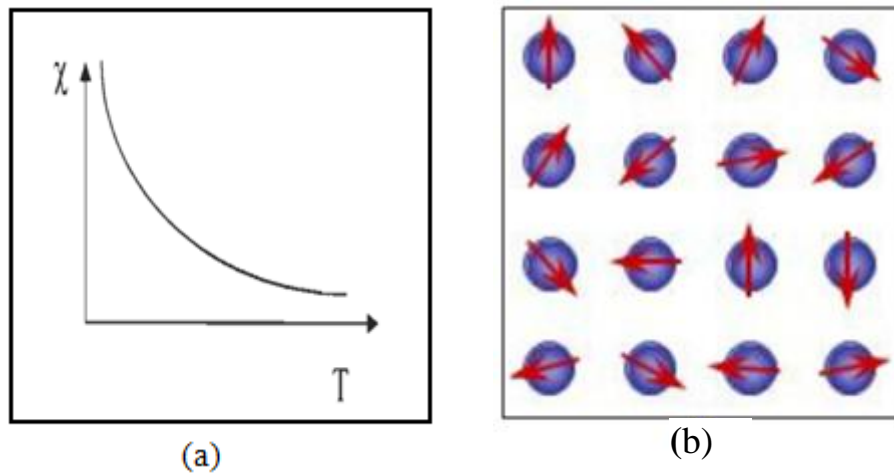


Figure I.3: a) $\chi(T)$, b) Arrangement de spin dans un matériau paramagnétique.

I.2.3. Le comportement ferromagnétique :

La classification des phénomènes spécifie le ferromagnétisme comme le troisième type de comportement magnétique. Contrairement, parmi certains matériaux, le ferromagnétisme désigne la propriété de s'aimanter particulièrement fortement sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, et pour certains de ces matériaux, de conserver cette forte aimantation même après la disparition du champ extérieur et ces propriétés sont dues à des arrangements coopératifs de spin et leurs fortes propriétés magnétiques sont dues à la présence de domaines magnétiques.

La présence de spins d'électrons non appariés dans les atomes est nécessaire pour que le ferromagnétisme se produise, car un moment magnétique net ne peut être généré qu'à partir d'un moment magnétique non nul dans les matériaux paramagnétiques.

La susceptibilité magnétique du ferromagnétisme est très élevée, autour de 10^5 ampères par mètre et varie avec H et donnée selon la loi de Curie-Weiss.

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \quad (\text{I.2})$$

Avec T_c est la température critique appelée température de Curie et $T > T_c$.

Cette loi n'est valable que pour le comportement d'un matériau magnétique au-dessus de la température de Curie lorsqu'il est magnétique et turbulent de sorte que les matériaux magnétiques sont disposés en champs et c'est un autre avantage majeur des matériaux magnétiques.

Pour un matériau ferromagnétique, χ diminue avec l'augmentation de T à cause de l'agitation thermique qui réduit l'alignement des moments magnétiques dans les domaines. Au-dessus de T_c , l'énergie thermique est suffisante pour détruire l'alignement coopératif et le matériau devient paramagnétique.

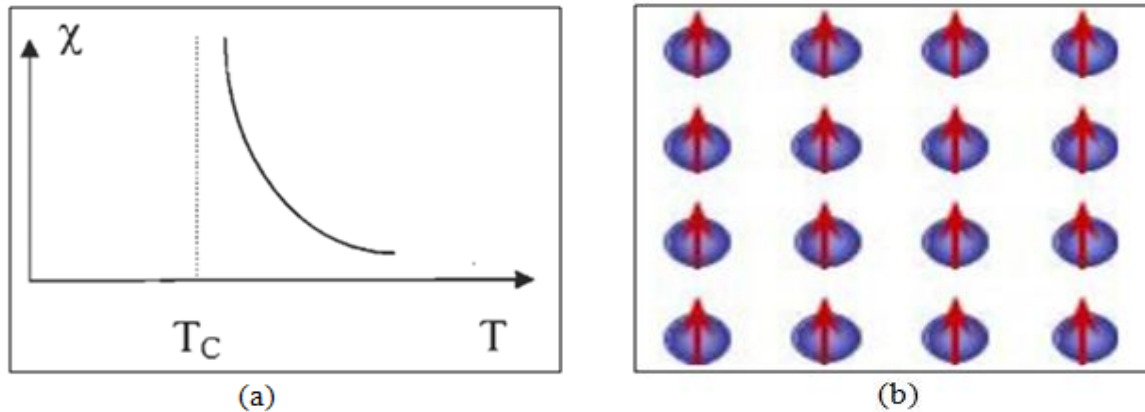


Figure I.4 :a) $\chi(T)$, b)Arrangement de spin dans un matériau ferromagnétique.

I.2.4. Le comportement antiferromagnétique :

Dans un matériau antiferromagnétique, les moments magnétiques de spin dans les couches adjacentes ont la même intensité et sont alignés antiparallèlement, comme le montre la figure I.5 et s'orientent de façon antiparallèle, ce qui donne une χ nulle ou très faible comme dans les paramagnétiques.

L'expression de la susceptibilité magnétique des composés antiferromagnétiques est donnée par la loi de Néel.

$$\chi = \frac{C}{T + T_N} \quad (I.3)$$

Avec T_N est la température de transition, appelée température de Néel.

L'alignement des moments est perturbé lorsque la température augmente par induction thermique, et la susceptibilité magnétique χ_m est petite et positif, et augmente jusqu'à la température T_N .

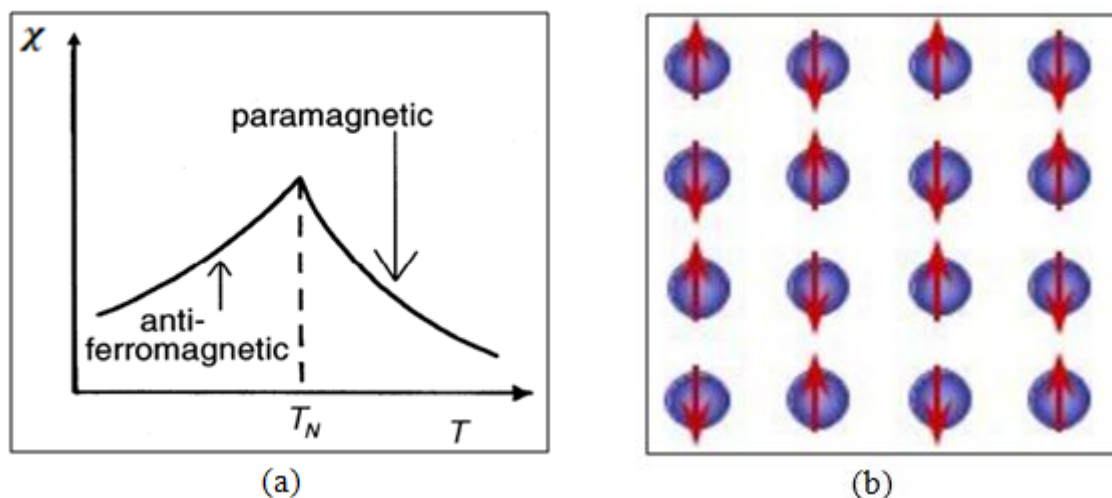


Figure I.5 :a) $\chi(T)$, b)Arrangement de spin dans un matériau antiferromagnétique.

I.2.5. Le comportement ferrimagnétique :

Le ferrimagnétisme est le magnétisme d'une classe d'oxydes connus sous le nom de «ferrites» et leur matériau est un matériau qui possède deux sous-réseaux qui n'ont pas la même aimantation ce qui provoque un état de déséquilibre des aimantations [3] et les atomes se sont mélangés aligné parallèlement et antiparallèlement. Les moments de spin magnétique dans les matériaux ferromagnétiques sont orientés antiparallèlement à ceux des matériaux antiferromagnétiques.

Néanmoins, les couches alternées n'ont pas la même intensité de moments

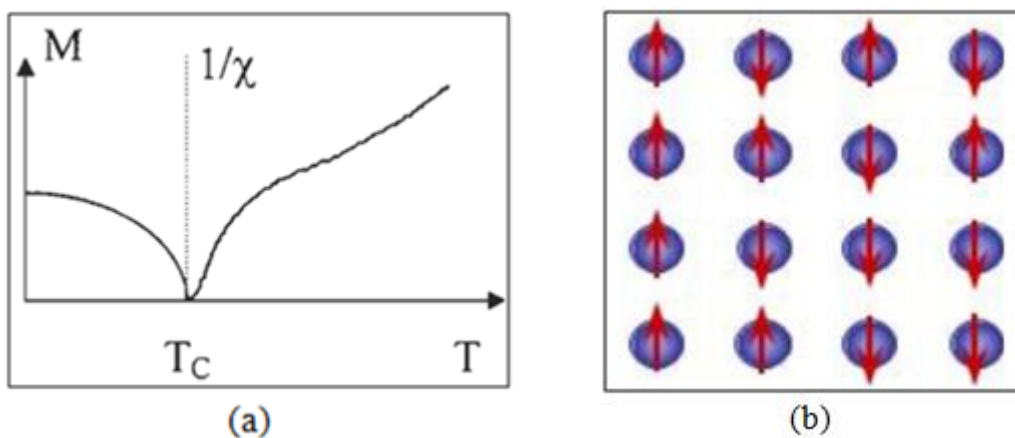


Figure I.6 : a) $M(T)$, b) Arrangement de spin dans un matériau ferrimagnétique.

magnétiques, donc une aimantation spontanée se produit.

L'augmentation de la température rend l'aimantation faible et le comportement global est très proche du paramagnétisme [4] et leur susceptibilité est grande et positif.

Bibliographies:

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave + local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Vienna, Austria), ISBN 3-9501031-1-2. (2001).
- [2] Singh. D. Planes waves, pseudo-potentials and the LAPW method. Boston, Dortrecht, London: Kluwer Academic Publishers , (1994).
- [3] O. HERNANDEZ, « *Elaboration et étude des propriétés physiques de couches minces monocristallines d'alliage de Heusler à faible amortissement magnétique pour composants hyperfréquences* », Université Toulouse , France, Thèse (2013).
- [4] F. DJERFAF, « *Caractérisation large bande diélectrique et magnétique de couche minces et substrats* », Université Ferhat Abbas, Setif, Thèse (2012)

CHAPITRE II

Les alliages d'Heusler

II. Les alliages d'Heusler :

II.1. Introduction :

Les alliages Heusler forme un sujet majeur de recherche en électronique de spin [1] depuis qu'ils ont été reconnus par l'ingénieur minier allemand Fritz Heusler en 1903 alors qu'il étudiait l'alliage Cu_2MnAl [2] comme ayant une demi-métallicité ferromagnétique. Un groupe de composés contenant environ 3000 composés est connu sous le nom d'alliages Heusler. Grâce à un large éventail de propriétés, ces composés peuvent avoir le comportement des demi-métaux, des semi-conducteurs et des supraconducteurs [3], et ils peuvent être classés en deux types : les alliages demi-Heusler de formule chimique XYZ et les alliages Heusler complets de composition X_2YZ , où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément des groupes III à V. Les principales combinaisons d'alliages Heusler sont illustrées sur la figure (II. 1).

Composés Heusler X_2YZ

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

Figure II.1: Tableau périodique des éléments. Le grand nombre de matériaux Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs [4].

II.2. Structure cristalline :

II.2.1. Les alliages demi-Heusler (Half-Heusler) :

Un alliage demi-Heusler a la formule chimique XYZ et se compose de deux parties; une partie ionique et une partie covalente. Un caractère cationique est associé à X et Y, alors qu'un caractère anionique peut être associé à Z, on peut donc procéder au tri des éléments en fonction de leur électronégativité.

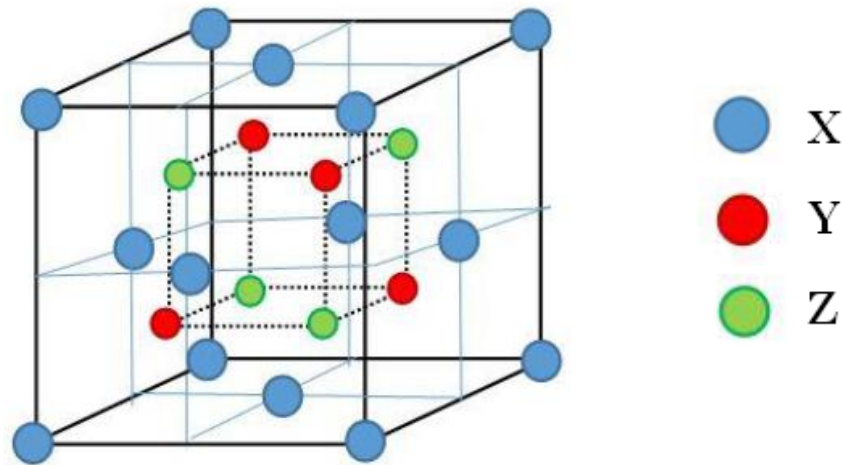


Figure II.2 :Structure cristalline de l'alliage demi Heusler

Tous les alliages demi-Heusler ont la formule de base XYZ et existent sous forme de structures cubiques (groupe d'espace 216, F-43m, C1_b) qui peuvent être construites en peuplant les sites octaédriques du réseau (Figure II.2).

Chaque sous-réseau de cette structure semi-Heusler est occupé par trois atomes X, Y et Z [5], et est interpénétré par trois autres sous-réseaux cubiques. Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4). Comme illustré dans le Tableau II.1, ce type de structure peut contenir trois arrangements atomiques qui ne sont pas équivalents.

Arrangement	4a	4b	4c
Type I	X	Y	Z
Type II	Z	X	Y
Type III	Y	Z	X

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

II.2.2. Les alliages Heusler (Full-Heusler) :

En général, les alliages Heusler ou Full-Heusler ont la formule X_2YZ , où X et Y représentent des éléments de transitions comme Cu, Ni ou Co, Y est souvent Mn ou Fe, et Z est généralement un semi-conducteur ou Al, et même un élément de terre rare ou un métal alcalino-terreux.

selon le groupe d'espace Fm-3m (groupe d'espace N° 225) les alliages d'Heusler de type X_2YZ se cristallisent avec Cu_2MnAl noté souvent ($L2_1$) comme prototype [6,7], la position 8c ($1/4, 1/4, 1/4$) est occupée par les atomes X, quant aux position 4a (0,0,0) et 4b ($1/2, 1/2, 1/2$) sont occupées par les atomes Y et Z, la structure $L2_1$ se constitue par quatre sous-réseaux CFC interpénétrés, dont deux parmi eux sont occupés par l'atome X.

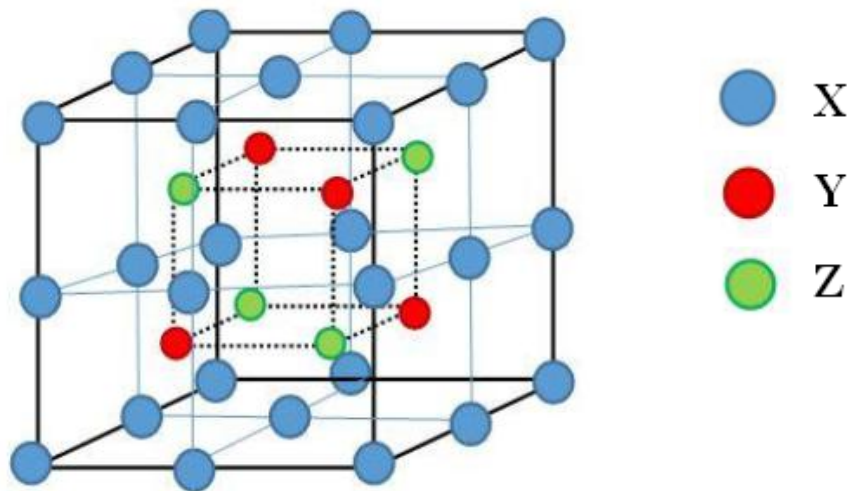


Figure II.3 : structure cristalline de l'alliage Heusler (*Full-Heusler*)

La structure $L2_1$, illustrée dans la figure II.3, a l'apparence d'une superstructure CsCl en déplaçant les bords des mailles unitaires de l'alliage Heusler de ($1/4, 1/4, 1/4$). Parfois, il y a des exceptions où l'ordre de classification est relatif à l'échelle d'électronégativité. On peut considérer que deux alliages CsCl forment un composé Heusler [8] lorsqu'ils sont combinés.

Ce sont des arrangements atomiques qui décrivent les propriétés des alliages d'Heusler, Il existe un certain nombre de différents types de désordre atomique qui sont observables pour les liaisons Heusler, ces types de désordre sont présentés ci-dessous avec des exemples des différentes combinaisons de positions Wyckoff :

- Les atomes de même nature occupent les positions 4a et 4b dans la phase $CsCl$ groupe d'espace $Fm-3m$.
- Pour un mélange entre les positions 4c et 4d, on obtient la phase $L2_1$ du groupe d'espace $Fm-3m$.
- Un atome supplémentaire sur les positions 4a et 4b crée le groupe d'espace de phase $B2$, $Pm-3m$.
- En mélangeant les positions 4a, 4c et 4b, 4d, on obtient la phase $B32a$ du groupe d'espace $Fd-3m$.
- Les atomes chimiques occupent exactement le même ensemble de positions de Wyckoff (4a, 4b, 4c et 4d) que ceux du groupe d'espace de phase $Im-3m$.

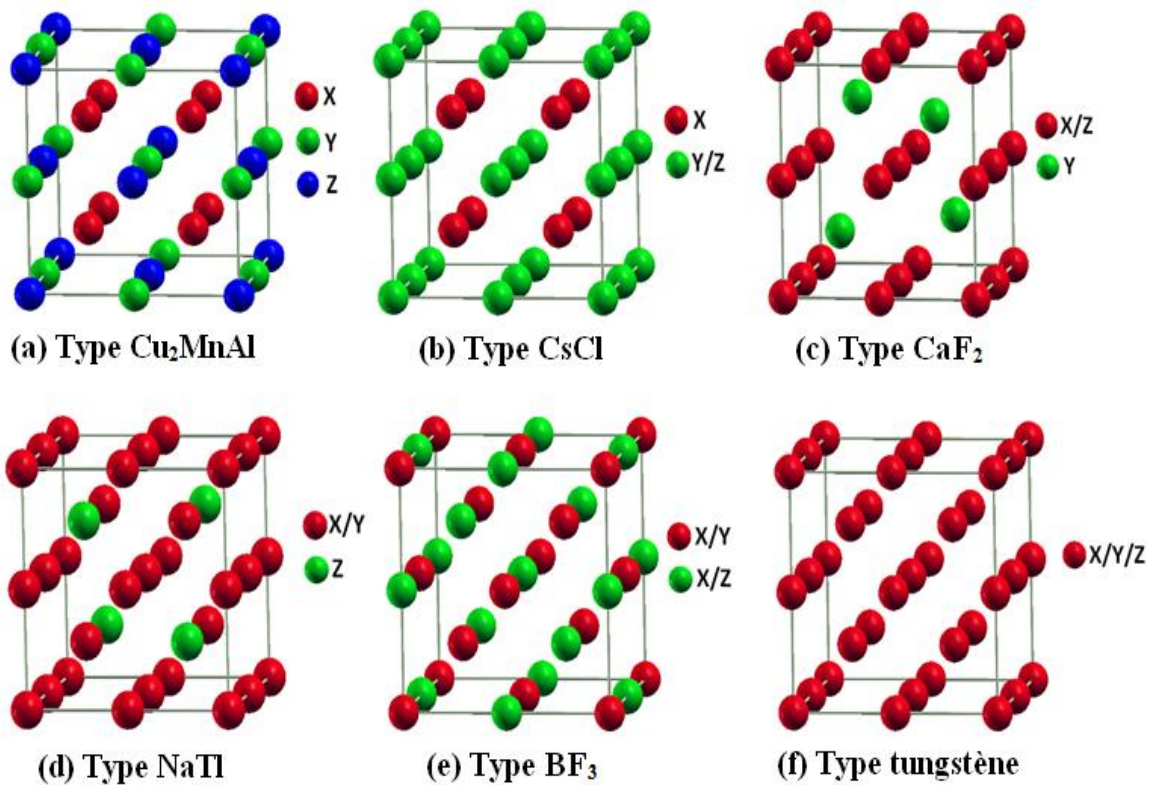


Figure II.4: Les différents types de désordre pouvant survenir dans la structure (Half/full) Heusler: (a) désordre de type Cu_2MnAl , (b) désordre de type $CsCl$, (c) désordre de type CaF_2 , (d) désordre de type BF_3 , (e) désordre de type $NaTl$ et (f) désordre de type tungstène.

Nous pouvons observer les types de perturbations atomiques suivants :

- 5 types désordre dans la structure demi Heusler : désordre de type CaF_2 , NaTl , Cu_2MnAl , CsCl , et tungstène.
- 4 types désordre dans la structure Heusler : désordre de type CsCl , BiF_3 , NaTl et tungstène.

II.2.3. Les alliages d'Heusler quaternaires :

Parmi les autres familles d'alliages Heusler, il existe une famille de composés connus sous le nom de quaternaires Heusler, qui ont quatre éléments chimiques différents, en plus d'avoir deux éléments différents X et X', avec ce dernier élément en 4a et 4d, respectivement. La valence de X' est plus basse que la valence de X, et la valence de l'élément Y est inférieure à la valence des deux éléments X et X'. La séquence des atomes le long de la diagonale du cube à face centré (fcc) est X-Y-X'-Z qui est énergétiquement la plus stable [9]. Par rapport à l'élément Y, celui-ci est placé en position 4b, tandis que l'élément Z est placé en position 4c ; c'est cette structure que présente le prototype LiMgPdSn dans le groupe d'espace F-43m (groupe d'espace N° 216) [10].

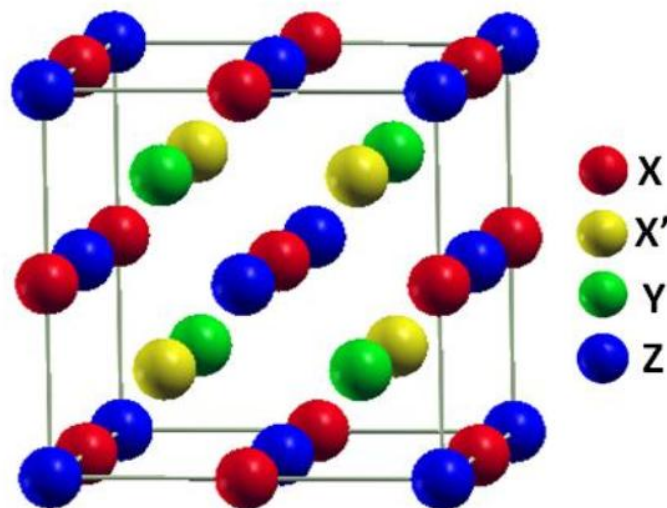


Figure II.5 : Structure cristalline d'Heusler quaternaire.

II.3. Demi-métallicité des alliages Heusler :

Dans une étude sur la structure de bande des alliages NiMnSb demi-Heusler [11], De Groot et *al.* introduit le terme de demi-métallicité pour la première fois au début de l'année 1980 [12]. Pour les électrons de spin majoritaire (up : $N_{\uparrow}(E_F)$) et minoritaire (down : $N_{\downarrow}(E_F)$), les matériaux ferromagnétiques ont une densité d'états ($N(E_F)$) au niveau de Fermi. En physique, la polarisation de spin P mesure l'asymétrie de spin et peut être exprimée comme suit [13]:

$$P = \frac{N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)}{N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)} \quad (\text{II.1})$$

Ils décrivent un demi-métal comme un matériau magnétique métallique pour les spins majoritaires et un semi-conducteur pour les spins minoritaires, une propriété qui a été déterminée au moyen de calculs de théorie des bandes sur les composés demi-Heusler, et en particulier sur NiMnSb, qui est le premier demi-métal prédit par les calculs de structure de bande. Ceci donne lieu à des polarisations des électrons de conduction au niveau de Fermi qui peuvent atteindre les 100%, envisageant alors de forts effets magnétorésistifs. Grâce à cette découverte, les chercheurs ont pu découvrir de nouveaux matériaux demi-métalliques. De Groot et *al.* ont mis au point un système de classification en distinguant trois types différents de ferromagnétisme demi-métallique [14], comme représenté sur la figure II.6.

Les demi-métaux ne doivent pas non plus être confondus avec les semi-métaux, comme le bismuth, qui ont un nombre égal de trous et d'électrons du fait d'un léger recouvrement entre les bandes de valence et de conduction.

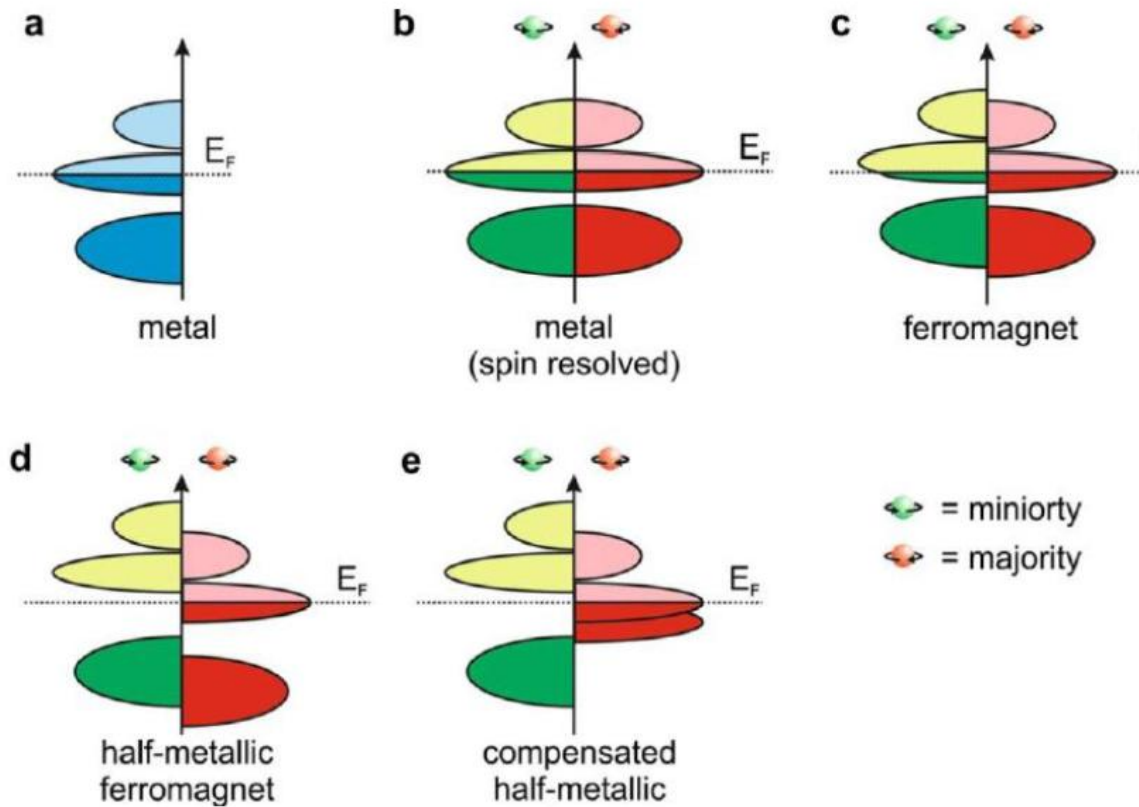


Figure II.6: Illustration schématique de la densité des états (a) d'un métal, (b) un métal (spin polarisé), (c) un ferromagnétique, (d) un ferromagnétique demi-métallique, et (e) un ferrimagnétique semi-métallique.

La Figure II.6 montre la densité d'états (DOS) et cela s'explique comme suit :

- (a) Un métal avec une densité d'états au niveau de Fermi.
- (b) Représentation polarisée du métal avec des états identiques dans chaque direction de spin ; l'état est également occupé dans les deux sens.
- (c) Montrant la DOS d'un matériau ferromagnétique avec certains états majoritaires et minoritaires décalés, entraînant une magnétisation mesurable.
- (d) Le métal demi-ferromagnétique (HMF) qui agit comme un métal pendant une orientation de spin mais se comporte comme un isolant pendant l'autre.
- (e) Un ferrimagnétique demi-métallique.

II.4. Les applications :

Les alliages Heusler ont fait l'objet d'une attention considérable au cours des dernières décennies, ce qui s'explique par leurs diverses propriétés, qui les rendent adaptés aux applications dans les appareils. En raison de la nature demi-métallique de ces alliages, de nombreux travaux ont été réalisés sur ceux-ci. Les propriétés semi-métalliques font partie des propriétés qui ont conduit à une multiplication des recherches sur ces alliages. Pour les Half-Heusler, De Groot et *al.* ont prédit ce trait en 1983. Et plus tard en 2002, la même attente par Galanakis et *al.* par conséquent, ils sont des candidats idéaux pour les électrodes dans les jonctions tunnel magnétiques car ils possèdent ce trait.

La nouvelle technologie spintronique tire parti du spin de l'électron et plus précisément du courant polarisé en spin. La spintronique a commencé avec la découverte de la magnétorésistance tunnel (TMR), qui a été découverte en 1975 [15], l'insertion de courant polarisé en spin à partir de matériaux ferrimagnétiques dans la matière non magnétique, découverte par Johnson et Silsbee en 1985 [16], et notamment la magnétorésistance géante (GMR).

La découverte de GMR et TMR a marqué le début d'une nouvelle branche de l'électronique appelée spintronique, qui exploitait le spin des électrons, et pas seulement leur charge électrique, afin de créer de nouveaux dispositifs.

II.4.1. Magnétorésistance Géante (GMR) :

Un effet appelé magnétorésistance géante (en anglais Giant Magnetoresistance ou GMR) est observé dans les structures de films minces constituées de couches alternées de couches ferromagnétiques et non magnétiques, tandis que P. Grünberg [17] et A. Fert [18] ont reçu le prix Nobel de physique 2007 pour leur découverte de ce l'effet dans les multicouches et sandwichs magnétiques (en 1986).

Observé dans un empilement de type ferro-métal-ferro, la GMR se manifeste par une différence de résistance électrique entre une configuration ou orientation des surfaces ferromagnétiques et une configuration ou orientation des surfaces ferromagnétiques qui est antiparallèle. Le rapport de magnétorésistance MR est donné par la relation suivante :

$$M_R = \frac{R_{\uparrow\downarrow} - R_{\uparrow\uparrow}}{R_{\uparrow\uparrow}} \quad (\text{II.2})$$

Avec $R_{\uparrow\downarrow}$ la résistivité pour la configuration antiparallèle et $R_{\uparrow\uparrow}$ la résistivité pour la configuration parallèle.



Figure II.7 : les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.

L'effet GMR correspond à une différence de résistance électrique en fonction de l'alignement de l'aimantation des couches ferromagnétiques, la résistance du dispositif diminue considérablement lorsque les couches sont alignées parallèlement les unes aux autres, mais augmente considérablement lorsque les couches sont alignées antiparallèlement.

II.4.2. Magnétorésistance Tunnel :

Dans les jonctions tunnel métal/isolant/métal, dans lesquelles les deux électrodes métalliques sont magnétiques, un phénomène de magnétorésistance similaire à la magnétorésistance géante a été observé appelé magnétorésistance tunnel (TMR), ce dernier a été découverte en 1975 par Michel Jullière [19], professeur à l'INSA de Rennes, utilisant le fer comme matériau ferromagnétique et le germanium comme isolant.

Dans les systèmes ferro/isolant/ferro, la TMR se manifeste par une variation de résistance électrique produite par un courant traversant l'isolant par effet tunnel, selon la configuration des matériaux ferromagnétiques. Les deux matériaux ferromagnétiques conduisant des états purement quantiques, il s'ensuit que la TMR résulte de la différence d'états disponibles de part et d'autre de la barrière, pour les spins up et les spins down.

Les jonctions tunnel sont des hétérostructures formées par une fine couche d'isolant de quelques nanomètres d'épaisseur, typiquement MgO ou Al₂O₃, prise en sandwich entre deux couches métalliques magnétiques pour permettre le transport électronique par effet tunnel. Un champ magnétique est créé lorsque deux matériaux ferromagnétiques sont

séparés par de fines membranes isolantes de l'ordre du nanomètre d'épaisseur. Selon l'orientation relative des deux couches magnétiques, la résistance électrique s'opposant au passage du courant par effet tunnel à travers la couche isolante varie. Alors que, la résistance est généralement la plus élevée lorsque les couches magnétiques sont antiparallèles.

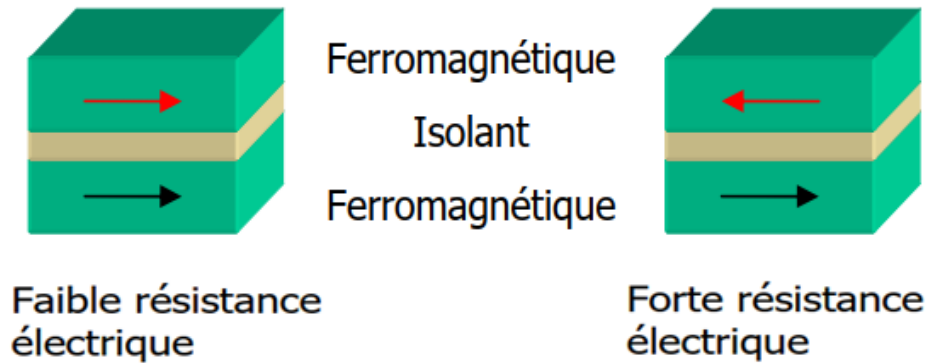


Figure II.8 : les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.

Une jonction tunnel magnétique est composée de deux couches ferromagnétiques séparées par un isolant ou un semi-conducteur. Les deux couches ferromagnétiques peuvent avoir leurs aimantations soit parallèles, la résistance entre ces deux couches est alors faible, soit antiparallèles et la résistance est alors élevée.

II.5. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons discuté les différents comportements magnétiques, où nous avons cité 3 types principaux qui expliquent les propriétés magnétiques de la plupart des éléments du tableau périodique à température ambiante, à savoir dia-, para- et ferromagnétique, et nous avons expliqué comment ils interagissent avec les champs magnétiques internes et leurs propriétés liées à différents domaines.

Après cela, nous avons présenté les alliages Heusler y compris (Full Heusler de formule X_2YZ , Half Heusler de formule XYZ et les Heusler quaternaires) et nous avons expliqué ses propriétés et structures cristallines et même l'application de ces matériaux à la spintronique.

Il ne fait aucun doute que ces alliages constituent une classe importante de matériaux magnétiques qui présentent de nombreux avantages et sont bien adaptés aux technologies actuelles, notamment au domaine de spintronique après la découverte de la magnétorésistance géante (GMR) et des tunnels de magnétorésistance (TMR).

Bibliographies:

- [1] R. A. de Groot and F. M. Mueller, "New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. 1983.
- [2] F. Heusler, "Über magnetische Manganlegierungen," *Verhandlungen Dtsch. Phys. Ges.*, vol. 5, p. 219, 1903
- [3] H. Tuzcuoglu, « *Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co_2FeAl* », Laboratoire des sciences des procédés et des matériaux (LSPM) Université Paris Nord-Paris XIII, Thèse (2014).
- [4] H. ZENASNI, « Etude théorique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des alliages Heusler », Université de Abou Bakebelkaid, Telemcen, (2013).
- [5] Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, U. Mizutani, *Phys Rev Lett* 79 1909(1997).
- [6] M. Morcrette, D. Larchera, J.M. Tarascona, K. Edstrom, J.T. Vaughey, M.M. Thackeray, *ElectrochimActa* 52 5339(2007).
- [7] W.H. Butler, C.K.A. Mewes, C. Liu, T. Xu, arXiv: vol 1 (2011) 3855.
- [8] V. Alijani, J. Winterlik, G.H. Fecher, S.S. Naghavi, C. Felser, *Phys. Rev. B* 83, 184428 (2011).
- [9] D. Xu, G. Liu, G.H. Fecher, C. Felser, Y. Li, H. Liu, *J. Appl. Phys.* 105, 07E901 (2009).
- [10] R. A. de Groot and F. M. Mueller, —New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. 1983.
- [11] Prinz, Gary A. Spin-Polarized Transport. *Physicstoday*, 58 (1995).
- [12] M. Hehn, F. Montaigne, and A. Schuhl, —Magnétorésistance géante et électronique de spin. *Techniques de l'Ingénieur l'expertise technique et scientifique de référence*, 10-Nov-2002.
- [13] C.M. Fang, G.A. de Wj, R.A. de Groot, *J ApplPhys* 91 (2002) 8340.
- [14] M. Julliere. *Physics Letters A*, 54 :225 –226, 1975.
- [15] M. Johnson and R. H. Silsbee. *Phys. Rev. Lett.*, 55 :1790–1793, Oct1985.
- [16] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, *PhysRevLett* 57 (1986) 2442.

[17] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, Phys Rev Lett 61 (1988) 2472.

[18] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, Angew. Chem. 2007, 119, 680; Angew.Chem. Int. Ed., 46 (2007), 668.

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

Chapitre III

Résultats

et discussions

III.1 Introduction :

Dans le cadre de la DFT, les méthodes de type *ab-initio* autorisent la prédiction des différentes propriétés physico-chimiques des matériaux solides. Plusieurs modèles théoriques ont été proposés dans le but d'interpréter des mesures expérimentales et de prédire de nouveaux effets ainsi que de concevoir de nouveaux matériaux.

Dans ce chapitre, on va effectuer un calcul *ab-initio* pour étudier et discuter les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques et mécaniques du composé Heusler Fe_2MnSn en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) avec la méthode FP-LAPW implémentée dans le code Wien2ket nous comparerons nos résultats avec ceux qui sont disponibles.

III.2. Introduction au code de calcul utilisé :

L'ensemble des calculs présentés dans ce travail ont été réalisés en utilisant le code de modélisation numérique appelé WIEN2k qui a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz de l'Institut de Chimie des Matériaux de l'Université Technique de Vienne (Autriche), ce code a été distribué pour la première fois en 1990 [1], Il s'agit d'un code de calcul *ab-initio*, et il fait partie d'un ensemble de logiciels de simulation numériques. Dans les années qui suivirent, ce code a été continuellement révisé et a subi plusieurs mises à jour. Des versions du code Wien original ont été développées (appelées, selon l'année de leur parution, Wien93, Wien95, Wien97, Wien2k (Wien2000)). Nous avons utilisé la version Wien2k (l'année 2020) qui a subi une amélioration notable, particulièrement en termes de vitesse, d'universalité (multiplateformes), facilité d'emploi, nouveaux dispositifs et de convivialité (interface utilisateur) [2]. Le package WIEN2k est écrit en langage FORTRAN90 et fonctionne sous un système d'exploitation UNIX permettant d'effectuer des calculs quantiques sur les solides périodiques. Il est constitué de plusieurs programmes indépendants basés sur la DFT. Le terme d'échange-corrélation figure dans ce code sous la version LDA de Perdew et Wang [3], GGA de Perdew, Burke et Ernzerhof [4] et autres. WIEN2k utilise la méthode full-potential (linearized) augmented plane-wave and local-orbitals [FP-(L)APW] pour résoudre les équations de Kohn-Sham.

La méthode des ondes planes linéairement augmentées (LAPW) [5,6] est une procédure destinée à résoudre les équations de Kohn et Sham pour trouver la densité de l'état fondamental, l'énergie totale et les valeurs propres d'un système à plusieurs électrons, cela

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

Par conséquent, les méthodes de la DFT sont classées en deux grandes catégories : les méthodes "tout électrons" et les approches dites pseudo-potentiels. De même pour les potentiels, il existe deux grandes classes : les potentiels tout électrons et les pseudo-potentiels. Ce que nous avons employé dans notre mémoire est la première catégorie, le potentiel peut être total (Full potentiel) dans le sens où aucune approximation n'est utilisée pour sa description. Parmi les méthodes "tout électrons", on compte la méthode des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW). C'est la méthode la plus utilisée de sa précision, mais elle est lourde en temps de calcul. Cette méthode est une modification fondamentale de la méthode des ondes planes augmentées (APW). L'idée de cette méthode (APW) est que la cellule primitive est divisée en deux types de région (**figure III.1**).

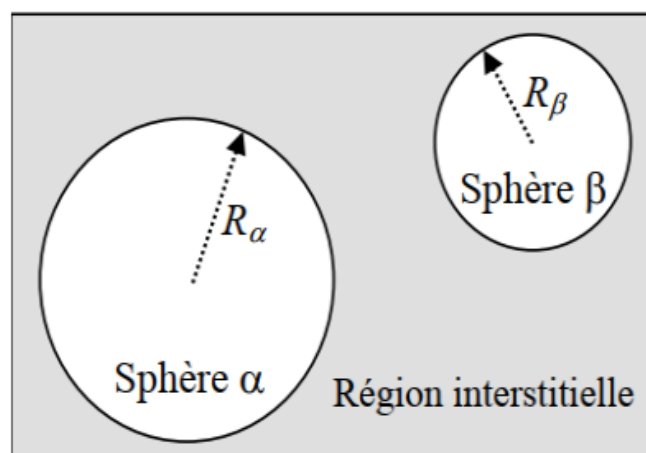


Figure III.1: Répartition de la cellule unitaire, une région interstitielle et des régions sphériques : Sphères α et β de rayons muffin-tin R_α et R_β respectivement.

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

Dans cette méthode le calcul est basé sur l'énergie de coupure (cut-off) qui sépare les états du cœur de ceux de valence, il existe aussi deux paramètres essentiels qui doivent être raffinés afin de décrire parfaitement les systèmes étudiés : le premier paramètre est le produit sans dimension $R_{mt}K_{max}$ noté RK_{max} , ce paramètre contrôle la taille de la base utilisée tels que R_{mt} représente le plus petit rayon de la sphère *muffin-tin* K_{max} est la valeur maximale du vecteur d'onde de la base utilisée dans la description de l'ensemble du système des électrons présents dans l'espace entre les sphères atomique. Ce produit représente le plus grand vecteur des \vec{K}_n dans l'extension des ondes planes décrivant la région interstitielle. Le deuxième paramètre est le nombre de points spéciaux k utilisés pour l'intégration dans la zone de Brillouin.

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

- Les bandes d'énergie, la densité des états.
- La densité d'électrons, la densité de spins et les facteurs de structure aux rayons X.
- L'énergie totale, les forces atomiques, les géométries d'équilibre, les optimisations de structure.
- Les gradients de champ électrique, les décalages isométriques, les champs hyperfins.
- La polarisation des spins (structure ferromagnétique, antiferromagnétique ou autres), le couplage spin-orbite.
- Les spectres d'émission et d'absorption aux rayons X.
- Les propriétés optiques.

III.2.1 Résolution des équations de Kohn-Sham (L'auto-cohérence dans les calculs) :

La résolution des équations de KS pour les points de symétrie dans la première Zone de Brillouin permet de simplifier les calculs, et pour résoudre ces équations, il faut choisir une base pour les fonctions d'onde que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales, appelé orbitales de Kohn-Sham (KS) :

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum c_{ji} \phi_j(\mathbf{r}) \quad (\text{III-1})$$

Où les $\phi_j(\mathbf{r})$ sont les fonctions de base et les C_{ji} les coefficients de développement.

Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations auto-cohérent schématisé par l'organigramme de la figure (III.2).

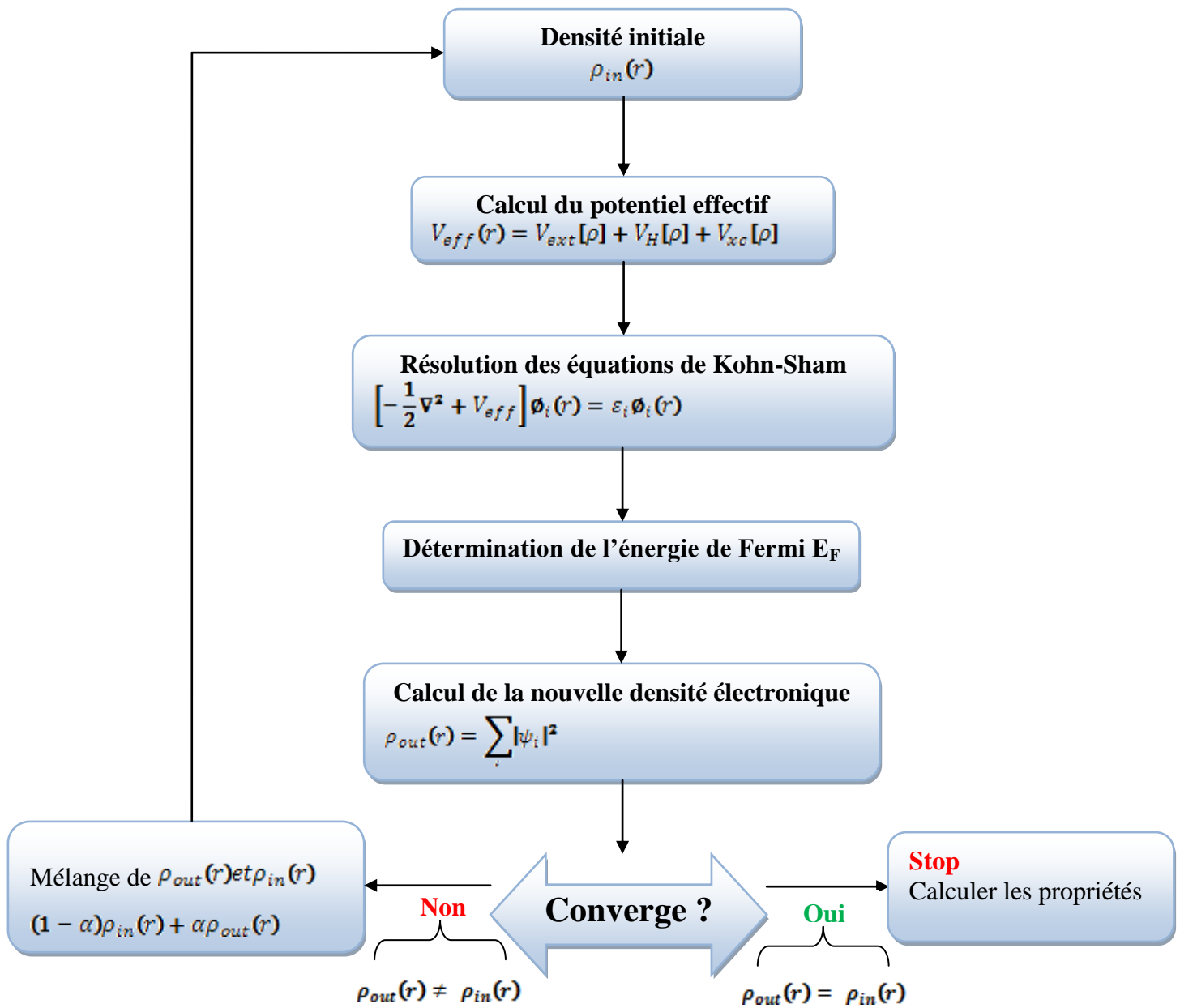


Figure III.2: Organigramme d'un calcul auto-cohérent dans une méthode basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique DFT.

III.3. Détail de calcul :

Dans ce travail, nos calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) [8] qui est implémenté dans le code WIEN2k [9] dans le cadre de la fonctionnelle de densité (DFT) [10]. L'énergie d'échange et de corrélation est paramétrée par l'approximation du gradient généralisé (GGA) proposée par Perdew, Burke et Ernzerhof [11].

Des calculs DFT (PBE-GGA) sont utilisés pour déterminer et obtenir les différentes propriétés des composés, ainsi que pour les comparer à d'autres résultats publiés [12].

Le paramètre $RMT \cdot K_{max}$ est choisi égale à 9, où RMT est le plus petit rayon muffin-tin de la sphère MT et K_{max} le module maximal du vecteur réciproque dans la première zone de Brillouin, avec 3000 k-points basés sur un maillage de $14 \times 14 \times 14$ selon Monkhorst-Pack, le processus des itérations self consistant est répété jusqu'à une énergie de convergence inférieure ou égale à la valeur de 10^{-4} Ry, l'énergie de séparation des états de cœur et des états de valence est prise égale à -6.0 Ry.

Les rayons muffin-tin (R_{MT}) sont choisis comme indiqué dans le tableau III.1 :

Elément	Fe	Mn	Sn
R_{MT} (u.a)	2,10	2,20	2,50

Tab III.1 : Les valeurs des RMT pour chaque atome du composé Fe_2MnSn .

❖ Ce choix est basé sur deux critères:

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

III.4 Propriétés structurales :

Dans le but de déterminer les propriétés de l'état fondamental tels que le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa première dérivée, nous avons calculé l'énergie totale pour différentes valeurs du paramètre du réseau a , par ajustement de l'énergie totale à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [13].

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'+1)} \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'(V - V_0)} \quad (\text{III-2})$$

Avec :

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'P}{B} \right)^{-1/B'} \quad (\text{III-3})$$

Où :

- E_0 et V_0 étant l'énergie et le volume à l'équilibre de la maille élémentaire.
- B et B' sont respectivement le module de compressibilité à l'équilibre et sa première dérivée par rapport à la pression.
- le module de compressibilité B est déterminé par :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-4})$$

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

L'énergie minimale qui représente l'état fondamentale est obtenue en traçant les énergies totales en fonction du volume pour les deux états à la fois, l'état non magnétique (NM) et l'état ferromagnétique (FM) :

La figure III.4 représente l'optimisation de l'énergie totale en fonction du volume du matériau Fe_2MnSn dans les deux structures cubiques possibles (groupes d'espace 216 et 225) et pour les deux états non magnétique (NM) et ferromagnétique (FM) après un fitting à l'aide de l'équation de Murnaghan.

Nous avons trouvé que l'alliage full Heusler Fe_2MnSn se cristallise dans la structure cubique, avec le groupe d'espace F-43m (SG N°216) à l'état ferromagnétique (FM).

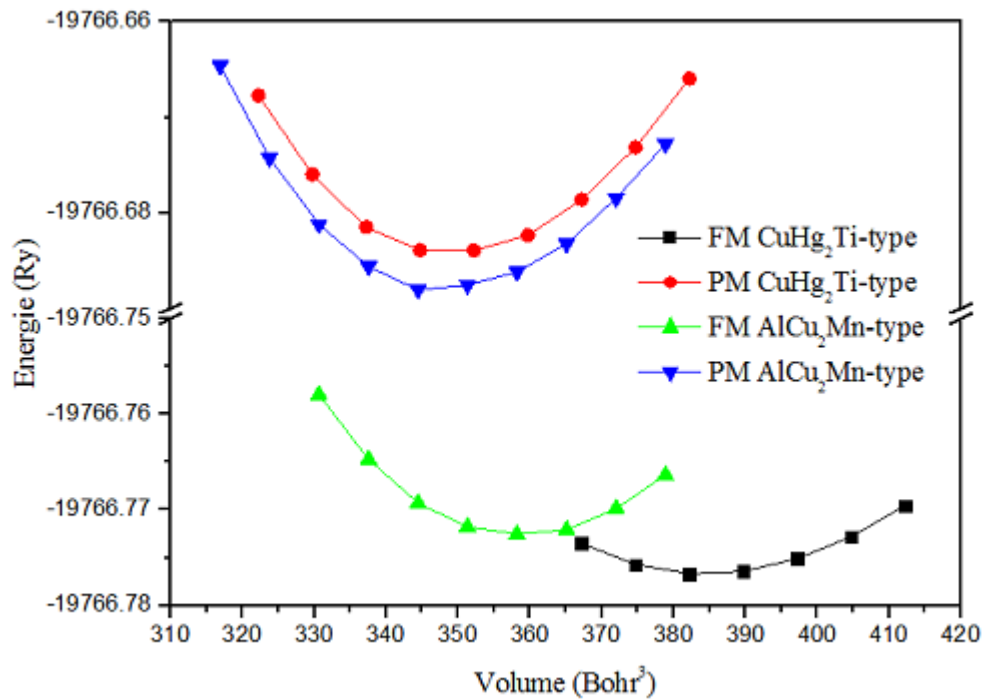


Figure. III.3: L'optimisation de l'énergie totale en fonction du volume pour les deux états (NM) et (FM).

Le tableau III.2 regroupe les résultats et les valeurs obtenues pour le paramètre de maille à l'équilibre, le module de compressibilité B ainsi que sa première dérivée B' , pour le composé Fe_2MnSn . Nos résultats calculés par la *FP-LAPW* sont comparés avec d'autres calculs théoriques disponible dans la littérature, il est claire qu'ils sont en bon accord.

	$a(\text{Å})$	$B(\text{GPa})$	B'
Nos calculs (GGA-PBE)	6,110	116.238	3.450
Theo Ref.(GGA-PBE) [14]	6.084	110.468	6.081

Tab III.2: constante du réseau $a(\text{Å})$; module de compressibilité $B(\text{GPa})$ et sa première dérivée B' de l'alliage Heusler Fe_2MnSn .

III.5. Propriétés électroniques :

Les propriétés électroniques du solide (structure de bande, densité d'état et densité de charge) dépendent essentiellement de la répartition des électrons dans les bandes de valence et de conduction, ainsi que de la valeur du gap. Ces derniers sont calculés pour l'alliage full Heusler du genre Fe_2MnSn à l'état d'équilibre avec le paramètre de maille optimisé de la structure la plus stable.

L'étude électronique nous renseigne parfaitement sur le comportement des matériaux c.à.d sur leur système le plus complexe quand il s'agit d'une discussion approfondie sur les états (d ou f), aussi sur la nature chimique qui engendre ce matériau.

Ces propriétés peuvent nous ouvrir de nouvelles issues pour des applications technologiques très avancées qui peuvent être très utiles pour l'industrie.

III.5.1. Structures de bandes :

Le solide est un système complexe qui contient un grand nombre d'atomes et d'électrons. Un atome a plusieurs niveaux d'énergie distincts, un électron lié à cet atome se trouve nécessairement dans l'un de ces niveaux. Cependant, dans une structure cristalline, les niveaux d'énergie des atomes indépendants se rassemblent dans la structure globale du cristal pour former des bandes d'énergie, où ces bandes d'énergie s'appellent les bandes d'énergies « autorisées » qui sont séparées par des zones « interdites », une illustration est présentée sur la Figure III.4.

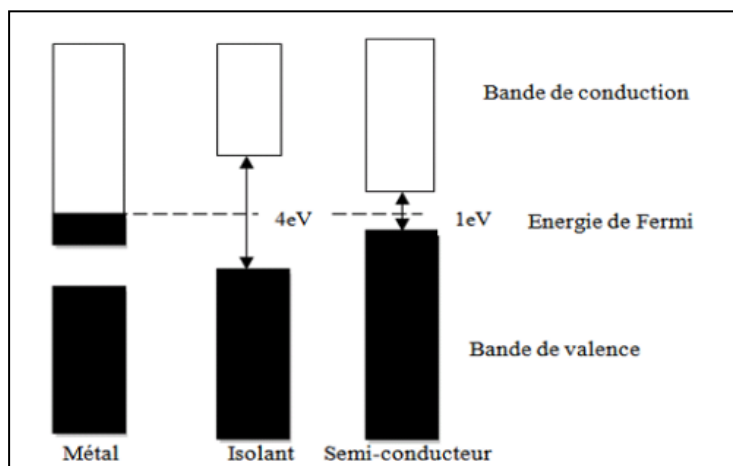


Figure III.4 : Relation entre la position des bandes d'énergie et le niveau de Fermi qui donne le comportement électronique métallique, semi-conducteur, et isolant [15].

Nous avons calculé les structures de bande électronique de Fe_2MnSn dans la structure cubique pour le spin majoritaire (up) et spin minoritaire (down) à leur constantes de réseau d'équilibre aux différents points de haut symétrie dans la zone Brillouin en utilisant l'approximation GGA. La structure de bande est tracée suivant les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin. La figure III.5 représente la structure de bandes de l'alliage full Heusler Fe_2MnSn .

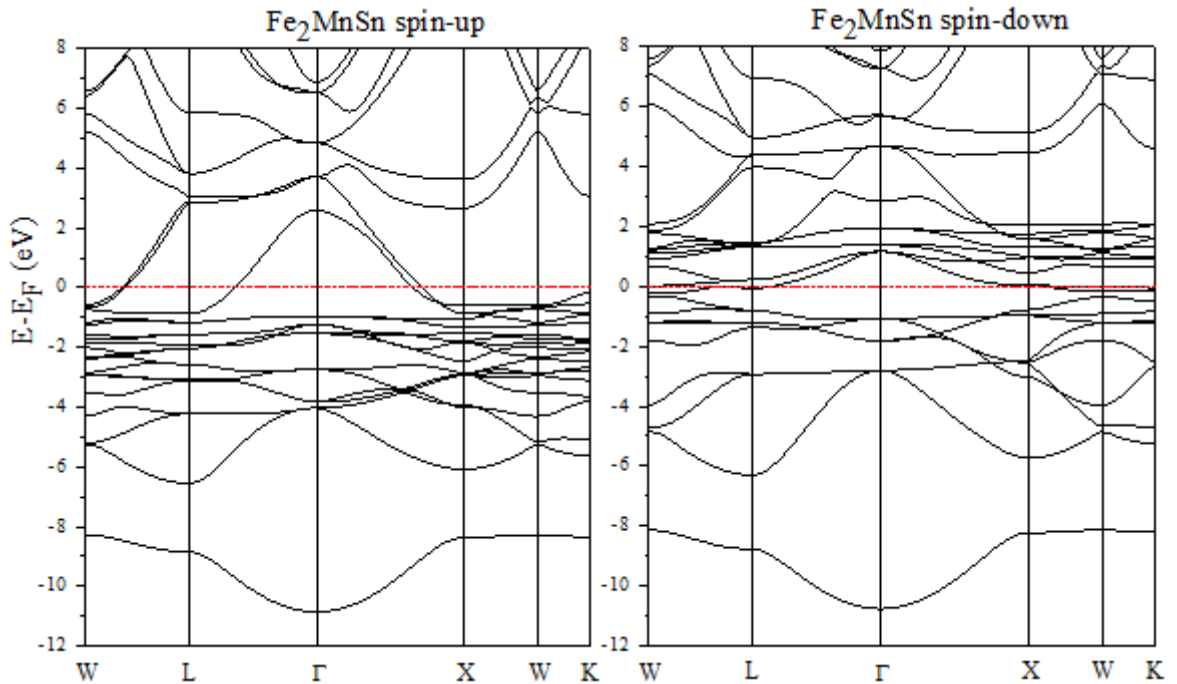


Figure III.5: La structure de bande de l'alliage Fe_2MnSn .

Nous observons que la structure de bande de spins majoritaires (spin-up) et de spins minoritaires (spin-down) présente des intersections métalliques au niveau de Fermi, pour le composé Fe_2MnSn , cela est expliqué par l'absence de la bande interdite "gap" autour de celui-ci et que provient du chevauchement entre les bandes d'énergie, ce qui indique le caractère métallique.

III.5.2. La densité d'états (D.O.S) :

Pour tenter d'élucider la nature de la structure de bandes électroniques, nous avons également calculé et tracé les densités d'états totales et partielles. La plupart des propriétés de transport sont déterminées sur la base de la connaissance de la densité d'états. Elle permet aussi de connaître la nature des liaisons chimiques dans un matériau et par conséquent le transfert de charge entre orbitales et atomes.

La densité d'état totale (DOS) et partielle (PDOS) du composé Fe_2MnSn sont calculées et tracées dans la figure III.6.

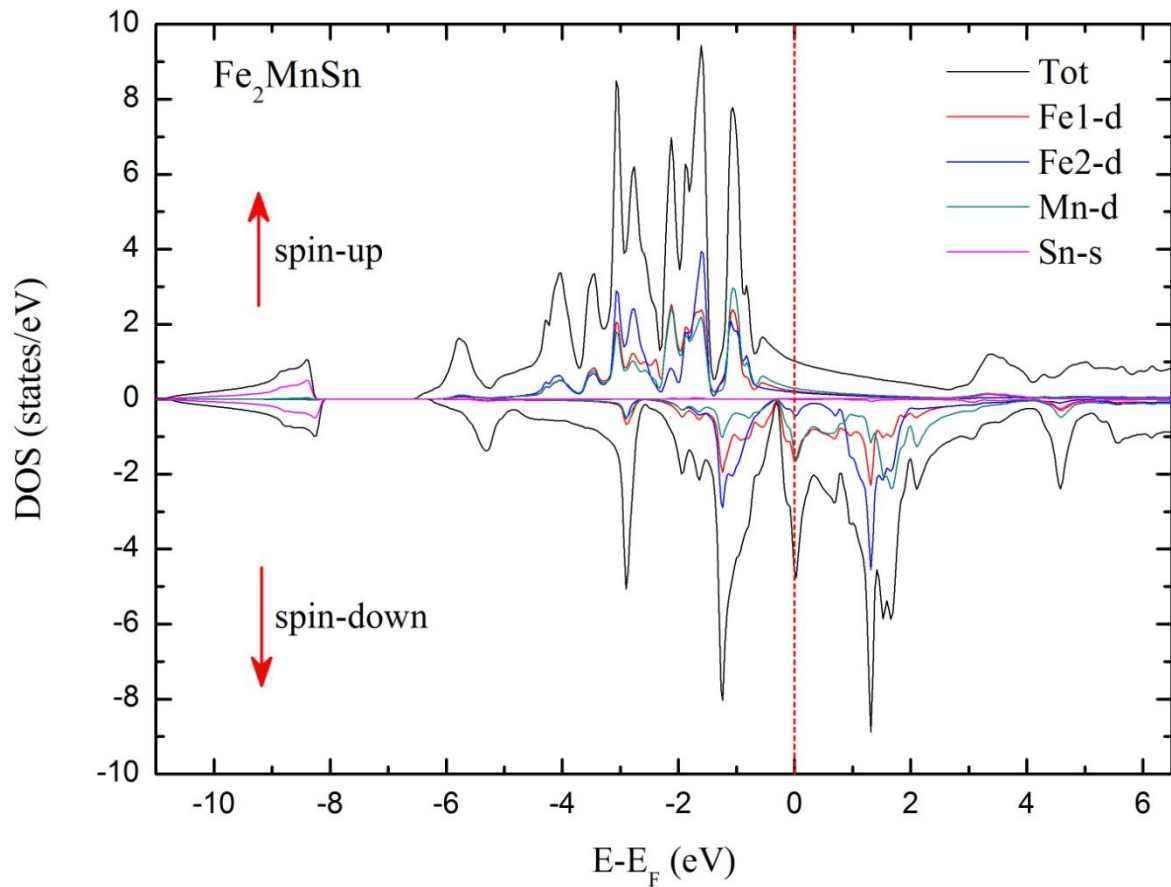


Figure III.6: La densité d'état totale et partielle du composé Fe_2MnSn .

D'après la figure II.6, il est clair que les électrons majoritaires (spin-up) et minoritaires (spin-down) ont des caractères métalliques.

La contribution des états électroniques diffère d'un atome à l'un autre, donc on peut tirer quelques remarques :

Au-dessous de niveau de Fermi :

Une contribution moyenne dans la densité d'états (DOS) des spins majoritaires de l'élément Sn dans une gamme d'énergies située entre -11 eV et -8 eV est due à la contribution des états 5s tandis que la contribution des éléments Fe_1 , Fe_2 et Mn est très faible

La contribution des éléments Fe et Mn est beaucoup plus dominante dans une gamme d'énergies située entre -6 eV et 0 eV, cette contribution est due essentiellement à la contribution des états $3d\text{-Fe}_1$, $3d\text{-Fe}_2$ et $3d\text{-Mn}$, tandis que la contribution des électrons $5s\text{-Sn}$ est presque nulle.

Au-dessous du niveau de Fermion remarque que la contribution des électrons des spins majoritaires est presque la même avec la contribution des électrons des spins minoritaires.

Au-dessus de niveau de Fermi :

Dans le cas des spins majoritaires vers la région au-dessus du niveau de Fermi, la contribution de tous les atomes est très faible, on peut dire qu'elle est négligeable dans une gamme d'énergies située entre 0 eV et 6.8 eV, par contre dans le cas de spins minoritaires l'intervalle d'énergies situées entre 0 eV et 3 eV est dominé essentiellement par les états $3d$ des atomes Fe_1 , Fe_2 et Mn, tandis que la contribution des électrons $5s\text{-Sn}$ est nulle. Dans la dernière gamme qui est située entre 3 eV et 6.8 eV, la contribution de tous les atomes est très faible et après ça devenir quasi inexistant.

III.6. Propriétés magnétiques :

Le moment magnétique de spin est défini par la différence entre le nombre d'occupation total des orbitales de spins majoritaires et nombre d'occupation total des orbitales de spins minoritaires, respectivement.

$$\mu = \sum_m (\eta_{m\sigma} - \eta_{m-\sigma}) \quad \text{(III-5)}$$

Le tableau III.3 regroupe les résultats et valeurs obtenues pour le moment magnétique total et local en (μ_B) à l'équilibre pour les composés Fe_2MnSn .

Alliage	M_{Tot}	M_{Fe_1}	M_{Fe_2}	M_{Mn}	M_{Sn}	M_{Int}
Fe_2MnSn	7,679	2,248	2,526	2,971	-0,074	0,008

Tab III.3: Le moment magnétique total et local en (μ_B) des composés Fe_2MnSn .

La relation entre le moment magnétique total M_{Tot} et le nombre d'électrons de valence dans la maille élémentaire N_v est donnée par la règle de Slater-Pauling (SP) [16] pour les composés Full-Heuslers de stœchiométrie X_2YZ est donné par la relation suivante :

$$m_{X_2YZ} = N_v - 24 \quad (III-6)$$

Nos calculs montrent que la contribution principale pour le moment magnétique total est donnée par les moments magnétiques de **Fe** et **Mn**, alors que $M_{Interstitial}$ et M_{Sn} contribuent moins au moment magnétique total.

III.7. Propriétés élastiques et propriétés mécaniques :

L'utilisation des méthodes de premier principe basées sur la DFT dans l'étude des propriétés élastiques des composés inorganiques est maintenant bien établie [17]. Tout corps solide, soumis à des contraintes externes, répond d'une légère déformation et cela est connu par l'élasticité. Les contraintes appliquées sont décrites par des tenseurs qui déterminent la direction des forces et le plan sur lequel elles s'appliquent.

Le matériau considéré peut ne pas être stable dans la structure proposée, alors qu'il existe une autre structure dans laquelle il est stable. L'étude des propriétés élastiques et mécaniques est un outil indispensable pour la vérification de la stabilité de tel matériau à telle structure, selon des critères bien définis [18].

III.7. 1. Propriétés élastiques et critères de stabilité :

Les propriétés élastiques donnent une information importante sur les caractéristiques des liaisons entre plans atomiques adjacents, et le caractère anisotrope des liaisons, et aussi sur la stabilité structurale. Elles définissent les propriétés d'un matériau qui subit une contrainte, se déforme et puis revient à sa forme originale après la cessation de la contrainte [17].

Le matériau, qui est l'objet de notre étude dans ce mémoire, se cristallise dans la phase cubique. Pour ce matériau nous avons utilisé le modèle de Mehl [19,20] afin de déterminer les constantes élastiques C_{ij} .

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 constants élastiques à partir de l'énergie totale consiste à imposer la conservation du volume de l'échantillon sous l'effet de la pression [21]. En utilisant le modèle de Mehl, nous calculons le module (C_{11} - C_{12}) par le tenseur de déformation orthorhombique en volume conservé :

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

Où δ est la déformation appliquée.

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

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + (C_{11} - C_{12})V \cdot \delta^2 + O[\delta^4] \quad (\text{III-7})$$

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

Pour obtenir les valeurs de C_{11} et C_{12} , nous avons besoin d'une deuxième équation qui est donnée par le module de compressibilité pour un matériau cubique isotrope par[22]:

$$B = \frac{1}{3(C_{11} + 2C_{12})} \quad (\text{III-8})$$

Finalement, pour déterminer la troisième constante élastique C_{44} , on exerce une déformation monoclinique à volume conservé, donné par l'expression suivant :

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

En remplaçant l'énergie totale :

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + \frac{1}{2}C_{44}V \cdot \delta^2 + O[\delta^4] \quad (\text{III-9})$$

Les constantes élastiques C_{ij} d'un matériau cubique doivent satisfaire les critères de stabilité de Born suivants [18]:

$$C_{11} > 0.$$

$$C_{44} > 0.$$

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

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

En utilisant le modèle de Mehl, à pression nulle nous avons obtenu les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de notre alliage qui sont listées dans le Tableau III.4.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Fe_2MnSn	151.474	92.400	107.442

Tab. III.4 : Constantes élastiques C_{ij} en GPa de l'alliage Fe_2MnSn .

D'après les résultats précédents, nos valeurs tirées du modèle de Mehl satisfont les critères de stabilité d'un matériau cubique.

III.7. 2. Propriétés mécaniques :

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.

En plus du module de cisaillement G , il est possible de calculer d'autres constantes mécaniques à partir de la détermination des constantes élastiques, tel que le module de Young E , le coefficient de Poisson ν , et le coefficient d'anisotropie de Zener A . Il existe deux principales méthodes pour calculer les constantes mécanique, il y a la méthode Voigt [23] et la méthode Reuss [24], qui conduisent respectivement au maximum et au minimum du paramètre élastique d'une façon asymptotique. En utilisant les relations standards suivantes :

$$G = \frac{1}{2(G_V + G_R)} \quad (\text{III-10})$$

$$G_V = \frac{1}{5(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})} \quad (\text{III-11})$$

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

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.

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (\text{III-13})$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (\text{III-14})$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} + C_{12}} \quad (\text{III-15})$$

Après avoir calculé le module de cisaillement G et le module de compressibilité B , nous pouvons facilement calculer les vitesses de l'onde sonore longitudinale et transversale du son, ils sont donnés par les équations de Navier [25] citées respectivement ci-dessous :

$$\nu_l = \left(\frac{3B + 4G}{3\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad \nu_t = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-16})$$

Où ν_l et ν_t sont les vitesses de son longitudinales et transversales, et ρ la densité.

$$\rho = \frac{M}{V}, \quad M = \frac{\sum M_i}{N_A}$$

$$\nu_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{\nu_t^2} + \frac{1}{\nu_l^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{III-17})$$

Où ν_m est la vitesse moyenne du son.

On peut aussi déterminer la température de Debye à partir de ces grandeurs, comme:

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi V_a} \right]^{\frac{1}{3}} v_m \quad (\text{III-18})$$

Avec θ_D est la température de Debye, h la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmann, V_a le volume atomique et n est le nombre d'atomes par unité de volume. Le tableau II.5 regroupant les résultats des propriétés mécaniques de l'alliage Fe₂MnSn qui sont obtenus en utilisant la GGA.

	Fe₂MnSn
G(GPa)	64,283
E(GPa)	161,896
$\frac{B}{G}$	1,744
ν	0,259
A	3,638
$\rho \left(\frac{g}{cm^3} \right)$	8,303
$v_l \left(\frac{m}{s} \right)$	4880,768
$v_t \left(\frac{m}{s} \right)$	2782,389
$v_m \left(\frac{m}{s} \right)$	3092,362
$\theta_D (K)$	379,571

Tab. III.5 : Le module de cisaillement et de Young (en GPa), le rapport B/G, le coefficient de Poisson, le coefficient d'anisotropie, la densité (en g.cm⁻³), la vitesse du son longitudinale, transversale et moyenne (en m.s⁻¹) et la température de Debye (en K) à pression nulle pour l'alliage Fe₂MnSn.

D'après le tableau III.5, nous remarquons que le rapport B/G est égal à 1,744 ceci est inférieur à la valeur critique 1,75 qui sépare les comportements ductile et fragile (fragile <1,75 < ductile) ce qui classifie notre matériau à la limite de la fragilité.

La valeur du coefficient de Poisson ν fournit des informations sur le caractère et la nature de liaison des matériaux solides, il a été rapporté par Haines et al. [26], pour les matériaux covalents a une faible valeur de 0,1 et il est supérieur ou égal à 0,25 pour les composés ioniques. Après avoir calculé le coefficient de poisson ν pour notre composé Fe₂MnSn, nous avons trouvé une valeur de 0,259; ce qui confirme la liaison ionique prédominante dans ce composé.

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 [27]. Concernant notre matériau, nous remarquons que le coefficient d'anisotropie a dépassé l'unité avec une valeur de 3,638; ce qui indique un caractère anisotropie.

Bibliographies:

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey, *Comput. Phys. Commun.* 59, 399 (1990).
- [2] P. Blaha, K Schwarz , G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *Wien2k, An Augmented Plan Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Techn. Universitat, Vienna, Austria, 2001, ISBN 3-9501031-1-2.
- [3] R.M. Ceperly and B.J.Provincia, Plenum, New York (1985).
- [4] J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, *Phys. Lett.*77, 3865 (1996).
- [5] J. C. Slater, *Phys. Rev.* 51,846 (1937).
- [6] J. C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry* 1. 35 (1937).
- [7] User's guide, wien2k 12.1 Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz (release 30.08.2012).
- [8] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* 136, 864 (1964).
- [9] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. K. vasnickaand J. Luitz, *WIEN2K*, 3, 1(2001)
- [10] J.P. Perdew, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J and C. Fiolhais, *Phys. Rev, B* 46, pp. 6671-6687(1992).
- [11] J.P. Perdew and Y.Wang, *Phys. Rev, B*45, pp. 13 244-13 249 (1992).
- [12] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev, A* 140, pp. 1133-1138 (1965).
- [13] Murnaghan FD. *ProcNatlAcadSci U S A*; **30** (1947) 244.
- [14] M. Sayah, S. Zeffane, M. Mokhtari, F. Dahmane, L. Zekri, R. Khenata,N. Zekri, *Condensed Matter Physics*, 2021, Vol. 24, No. 2, 23703: 1–9.
- [15] JérômFaist, " Introduction à la Physique des Semi-Conducteurs, " Neuchâtel (2001).
- [16] HongzhiLuo, YuepengXin, Bohua Liu, Fanbin Meng, Heyan Liu, Enke Liu, GuanghengWu ,*J.AlloysCompd*, 2016, 665, 180–185,doi:10.1016/j.jallcom.2015.11.207.
- [17] H. Rached, D. Rached, R. Khenata, Ali H. Reshak, and M. Rabah. *Phys. Status Solidi B* 246, 7 1385-1393(2009)
- [18] Wang, S. Yip, S. R. Phillpot, and D. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 4182.
- [19] M. J. Mehl, J. E. Osburn, D. A. Papaconstantopoulos, and B. M. Klein, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 10311.

- [20] M. J. Mehl, B. M. Klein, and D. A. Papaconstantopoulos, in *Intermetallic Compounds: Principles and Practice, Principles*, edited by J. H. Westbrook and R. L. Fleischer, Vol.I. (1995).
- [21] Nye, J.F., *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices* 1985: Oxford university press.
- [22] H. ABBASSA, « *Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler* », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [23] W. Voigt, *Lehrbuch der Kristallphysik* (Teubner, Leipzig, 1928), p, 716 [in German].
- [24] A. Reuss, *Z. Angew, Math, Mech.* 9, 49 (1929).
- [25] O. L. Anderson, *J. Phys. Chem. Solids* 24 (1963) 909.
- [26] Haines, J., Leger, J.M., Bocquillon, G.: *Annu. Rev. Mater. Sci.* 31, 1 (2001)
- [27] E.Schreiber and O. L. Anderson, N. Soga, *Elastic Constants and Their Measurements*, (1973) 82-125.

Conclusion générale

Conclusion générale et perspectives:

Ce modeste mémoire nous a permis de mieux appréhender les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques et mécaniques de l'alliage Heusler Fe_2MnSn , en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et cela par la méthode FP-LAPW implémentée dans le code Wien2k, les calculs sont réalisés en traitant l'énergie d'échange et des corrélations par l'approximation du gradient généralisé GGA.

Notre étude facilite de fournir une description détaillée des propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques et mécaniques telles que: l'optimisation structurale, la structure de bandes, la densité d'états totale et partielle, le moment magnétique et les coefficients d'élasticité. Les principaux résultats sont résumés comme suit:

L'optimisation de l'énergie totale de notre alliage Fe_2MnSn en fonction du volume dans les deux configurations non-magnétique (NM) et ferromagnétique (FM) nous a permis d'affirmer que la structure à l'état ferromagnétique (FM) est plus stable par rapport à celle de l'état non-magnétique (NM). Ainsi que le paramètre de maille optimisé est en bon accord avec d'autre résultat théorique.

L'analyse des propriétés électroniques (structure de bande, densité d'états DOS et P-DOS) donne une explication détaillée sur le caractère métallique de ce matériau.

Le résultat du moment magnétique révèle et confirme le caractère magnétique dans notre alliage full Heusler Fe_2MnSn .

Les propriétés élastiques ont confirmé la stabilité mécanique pour notre composé dans la structure cubique.

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

- Effectuer un calcul des phonons pour confirmer la stabilité structurale de notre matériau.
- Utiliser d'autres méthodes de simulation, afin de confirmer nos résultats.
- Prédire l'évolution des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques en fonction de la température.
- Réaliser des travaux expérimentaux sur l'élaboration et la caractérisation de ces matériaux (à la limite des moyens disponibles).