



Department of Process Engineering

Ref :...../U.M/F.S.T/2024

قسم هندسة الطرائق

رقم : ..... / ج.م.ك.ع.ت//2024

## MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : **GÉNIE DES PROCÉDÉS**

Option: **GÉNIE DES PROCÉDÉS DES MATÉRIAUX**

### THÈME

*Propriétés Electromagnétiques et Thermodynamiques  
d'un matériau prospectif pour la Spintronique*

Présenté par:

- KADDOUR BAKIR Hayet.
- KADDOURI Inesse.

Soutenu le 06/06/ 2024 devant le jury composé de:

Présidente :	Mehtougui Nabila	Grade	MCA	U - Mostaganem
Examinatrice:	Benatmane Saadiya	Grade	MCA	U - Mostaganem
Encadrante :	Bendahma Fatima	Grade	Professeur	U - Mostaganem

Année Universitaire : 2023 / 2024

# Remerciements

---

*On remercie Allah le tout-puissant qui nous a offert la santé, le courage, la patience et la volonté, en nous permettant de mener à terme ce présent travail.*

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

*On remercie très sincèrement notre encadrante ❀ **Mme Bendahma Fatima** ❀ d'avoir proposé et dirigé ce travail, mais surtout d'avoir ménagé son temps pour mettre à notre disposition tous les moyens nécessaires. On est très reconnaissant envers elle pour son aide, ses conseils, sa compétence.*

*On adresse aussi nos remerciements aux membres de jury **Docteur Mehtougui Nabila** et **Docteur Benatmane Saadiya** pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail.*

*On ne laissera pas cette occasion passer, sans remercier tous les enseignants et du département de Génie des Procédés de l'université de Mostaganem au cours des années passées pour leurs aides et leurs précieux conseils et pour l'intérêt qu'ils portent à notre formation.*

*Enfin, nos remerciements à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce projet.*





## *Dédicaces*

---

*Je dédie ce modeste travail à Ma chère et adorable mère Nezha qui a souffert sans me laisser souffrir, qui ne m'a jamais dit non à mes exigences et qui m'a soutenue et encourager durant ces années d'études.*

*À mon Cher père Mechri à qui je dois ma vie ma réussite et tout mon respect .*

*À mes petits frères Yassine et Racim .*

*À ma grande mère qui je souhaite une bonne santé.*

*À ma tante Ninez et mes cousines Sisi et Rihem et toute la famille et à ceux qui m'ont donner amour et vivacité .*

*À ma chère binôme Hayet pour son entente et sa sympathie*

*À mes chères copines Mimi et Chaimaa pour leurs aides et support dans les moments difficiles .*

*À tous ceux qui me sont chers aux personnes qui m'ont aidé et encourager de près ou de loin qui étaient toujours à mes côtés et qui m'ont accompagné durant mon chemin d'études.*

*Inesse.*

# Dédicaces

---



*Je dédie ce travail :*

- ❖ *À mes chers parents.*
- ❖ *À mes chères sœurs et mon cher frère.*
- ❖ *À toute ma famille.*
- ❖ *À ma chère binôme Inesse.*
- ❖ *À toutes mes amies et à tous ceux qui m'aiment.*
- ❖ *À tous ceux qui m'ont aidé de loin où de près à ce travail.*
- ❖ *À tous qui lira ce mémoire un jour.*

**Hayet.**

## ***RÉSUMÉ***

---

L'objectif de ce travail est l'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques de l'alliage semi-Heusler  $RbCrC$ , les calculs ont été réalisés à l'aide du code de calcul Wien2K, qui utilise la méthode d'onde plane augmentée linéarisée avec un plein potentiel FP-LAPW, basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, avec l'approximation de gradient généralisé GGA. Les résultats que nous avons obtenues sont : D'après les propriétés électroniques, notre composé est un demi-métal, le moment magnétique calculé correspond à la règle de Slater Pauling et les propriétés thermodynamiques révèlent que le composé  $RbCrC$  présente un comportement thermoélectrique, Ainsi, notre matériau est un candidat qualifié dans des applications spintroniques.

**Mots clés:** Semi-Heusler, Wien2K, Approximation du gradient généralisé (GGA), Propriétés thermodynamiques.

## ***ABSTRACT***

---

The objective of this work is the study of the structural, electronic, magnetic and thermodynamic properties of the Half-Heusler alloy RbCrC, the calculations were carried out using the Wien2K calculation code, which uses the wave method Linearized augmented plane with full potential FP-LAPW, based on density functional theory DFT, with the generalized gradient approximation GGA. The results we obtained are According to the electronic properties, our compound is a half metal, the calculated magnetic moment matches Slater Pauling's rule and the thermodynamic properties reveal that the RbCrC compound exhibits thermoelectric behavior, Thus, our material is a qualified candidate in spintronic applications.

**Keywords:** Half-Heusler, Wien2K, generalized gradient approximation (GGA), Thermodynamic properties.

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخواص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية والديناميكية الحرارية لسبائك شبه هوسلر  $RbCrC$  ، وتم إجراء الحسابات باستخدام كود حساب Wien2K، والذي يستخدم الطريقة الموجية المستوى الخطي المعزز مع الإمكانيات الكاملة LAPW FP-، استنادًا إلى نظرية الكثافة الوظيفية DFT، مع تقريب التدرج المعمم GGA النتائج التي حصلنا عليها هي وفقًا للخصائص الإلكترونية، فإن مركبنا عبارة عن نصف معدن، والعزم المغناطيسي المحسوب يطابق قاعدة سلاتر بولينج، وتكشف الخواص الحرارية أن مركب  $RbCrC$  يُظهر سلوكًا كهروحراريًا، وبالتالي، فإن مركبنا مرشح مؤهل في مجال الإلكترونيات الدورانية.

**الكلمات المفتاحية:** نصف Heusler، Wien2K، تقريب متدرج معمم (GGA)، الخصائص الديناميكية الحرارية .

# SOMMAIRE

---

Remerciements.....	I
Dédicaces.....	II
Résumé.....	IV
Sommaire.....	VII
Liste des figures.....	IX
Liste des tableaux.....	XI
Introduction Générale.....	1
Références.....	3

## **CHAPITRE I : Généralité sur les Heusler**

<b>I.1.</b> Introduction .....	5
<b>I.2.</b> Généralités sur les alliages d'Heusler .....	5
<b>I.3.</b> Types d'alliage Heusler .....	6
<b>I.3.1.</b> Les alliages semi-Heusler (Half-Heusler) .....	6
<b>I.3.2.</b> Les alliages Heusler complets (Full-Heusler).....	7
<b>I.3.3.</b> Les alliages Heusler quaternaires. ....	7
<b>I.4.</b> Structure cristalline des alliages Heusler .....	8
<b>I.5.</b> Utilisations des alliages Heusler.....	9
<b>I.6.</b> Le magnétisme et les alliages Heusler .....	10
<b>I.7.</b> Spintronique .....	11
<b>I.7.1.</b> Domaine d'application de la Spintronique .....	11
<b>Références bibliographiques</b> .....	13

## **CHAPITRE II : Calcul Numérique**

<b>II.I</b> Les bases de la physique théorique moderne.....	16
<b>II.1.1</b> Équation de Schrödinger .....	16
<b>II.2.</b> Approximation de Born-Oppenheimer.....	17
<b>II.3.</b> Approximation de Hartree et de Hartree-Fock.....	18
<b>II.4.</b> Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	19
<b>II.4.1.</b> La méthode de Thomas-Fermi .....	19

<b>II.4.2.</b> Équations de Kohn et Sham .....	19
<b>II.4.3</b> Résolution des équations de Kohn-Sham.....	21
<b>II.5.</b> Traitement de l'échange et de corrélation.....	22
<b>II.5.1.</b> Approximation de la densité locale ( <b>LDA</b> ).....	22
<b>II.5.2.</b> Approximation du gradient généralisé ( <b>GGA</b> ) .....	23
<b>II.6.</b> Code Wien2K.....	23
<b>Références bibliographiques</b> .....	25

### **CHAPITRE III : *Résultats et Discussions***

<b>III.1</b> INTRODUCTION .....	28
<b>III.2.</b> Propriétés Structurales .....	28
<b>III.3.</b> Propriétés électroniques.....	29
<b>III.3. 1</b> Structure de bandes.....	29
<b>III.3. 2</b> Densité d'états (DOS).....	30
<b>III.4.</b> Propriétés magnétiques.....	32
<b>III.5.</b> Propriétés thermodynamiques .....	32
<b>III.5.1</b> Module de compressibilité (B ) .....	33
<b>III.5. 2</b> Capacité thermique à volume constant (Cv).....	33
<b>III.5.3</b> Température de Debye ( $\theta_D$ ) .....	34
<b>III.5.4</b> Coefficient de dilatation thermique ( $\alpha$ ).....	35
<b>III.6.</b> Conclusion.....	36
<b>Références bibliographiques</b> .....	37
<b>CONCLUSION GÉNÉRALE</b> .....	38

## Liste des Figures

Figure N°	<i>Titre de Figure</i>	Page
<b>Figure I.1</b>	Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs	06
<b>Figure I.2</b>	Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler) : <b>a</b> ) régulière ; <b>b</b> ) inverse.	07
<b>Figure I.3</b>	Illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles des composés Heusler quaternaires <b>(a)</b> type 1, <b>(b)</b> type 2 et <b>(c)</b> type 3	08
<b>Figure I.4</b>	Représentation schématique de la structure L21, B2 et A2 pour $X_2YZ$	09
<b>Figure I.5</b>	Une diode tunnel magnétique	10
<b>Figure I.6</b>	Un transistor à l'effet de champ	10
<b>Figure I.7</b>	Une mémoire MRAM.	12
<b>Figure I.8</b>	Un Disque Dur.	12
<b>Figure II.1</b>	Mise en œuvre d'algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer	18
<b>Figure II.2</b>	Processus d'itération auto-cohérente utilisé pour résoudre les équations de Kohn Sham.	21
<b>Figure III.1</b>	Variation de l'énergie totale en fonction du volume du composé RbCrC	28
<b>Figure III.2</b>	Structure de bande du RbCrC (up/dn) obtenue par GGA-PBE.	30
<b>Figure III.3</b>	Densité totale et partielle des états du composé RbCrC.	31
<b>Figure III.4</b>	Variation du module de compressibilité B en fonction de la température de RbCrC.	35
<b>Figure III.5</b>	<i>Variation de la capacité thermique <math>C_v</math> en fonction de la température de RbCrC.</i>	36

<b>Figure III.6</b>	Variation de la température de Debye $\theta_D$ en fonction de la température de RbCrC	37
<b>Figure III.7</b>	Variation du coefficient de dilatation thermique $\alpha$ en fonction de la température	37

## Liste des Tableaux

<b>Tableau N°</b>	<i>Titre du Tableau</i>	<b>Page</b>
<b>Tableau III. 1</b>	Le paramètre de réseau $a$ ( $\text{\AA}$ ), le module de compressibilité $B$ (Gpa), sa première dérivée de pression $B'$ , l'énergie $E_C$ (eV), le l'énergie de formation $E_f$ (eV) et l'énergie totale minimale $E(Ry)$	29
<b>Tableau III. 2</b>	Moment magnétique total ( $M_{tot}$ en $\mu B$ ), moment magnétique interstitiel ( $M_{int}$ en $\mu B$ ) et les moments magnétique atomiques de composé semi-heusler RbCrC	32

## **INTRODUCTION GÉNÉRALE**

Le développement technologique et industriel dépend beaucoup de la recherche des nouveaux matériaux et alliages à partir du tableau périodique des éléments en se basant sur la loi naturelle qui affirme que la combinaison de deux matériaux différents ne présente pas une combinaison de leurs propriétés mais donne plutôt naissance à des caractéristiques nouvelles propres à l'alliage [1].

La physique de la matière condensée et la science des matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans l'amélioration des applications technologiques. Avant d'employer les matériaux (solides) dans l'industrie, il faut s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques...etc.

Les alliages Heusler ont été découverts par *Friedrich Heusler* au début du XXème siècle. Leur principale caractéristique était alors d'être un alliage ferromagnétique sans qu'aucun de leurs constituants ne le soit (le premier matériau était composé de Cu, Mn et Al ; le  $Cu_2MnAl$ ). Cet état magnétique est dû à un arrangement et une distribution particulière de certains atomes qui joue un rôle majeur sur leurs propriétés physiques.

Depuis la prédiction de la demi-métallicité de l'alliage Heusler NiMnSb par De Groot et ses collaborateurs en 1983[2], l'intérêt scientifique des alliages Heusler ont été renouvelé et ces matériaux ont commencé à avoir des intérêts à la fois théoriques et expérimentaux et surtout en spintronique. En passant de l'électronique basée sur le contrôle de courants de charges, électrons de charge négative et trous de charge positive, vers un nouveau concept appelé l'électronique de spin, ou spintronique, domaine émergent qui projette d'utiliser le spin des électrons comme un degré de liberté supplémentaire pour générer des fonctionnalités nouvelles et modernes. Plusieurs alliages Heusler ont été ensuite prédits par des calculs ab-initio.

Parmi ces méthodes ab-initio, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) qui est l'une des méthodes les plus précises actuellement pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), élaborée par Hohenberg et Kohn dans les années soixante [3, 4]. De plus, la rapidité de calcul de la méthode FP-LAPW est impressionnante par rapport aux autres méthodes de premier principe.

Les méthodes ab-initio sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés des systèmes complexes, elles ont pu remplacer des expériences très coûteuses ou très dangereuses. Ces méthodes de calculs reposent sur la théorie de la fonctionnelle de la densité,

théorie qui a connu une grande réussite dans le domaine de la prédiction des propriétés structurales, magnétiques, électroniques, thermoélectriques, optiques, thermodynamiques.....

Notre objectif dans ce travail est d'aboutir à une meilleure compréhension des propriétés électromagnétiques et thermodynamiques du composé semi-Heusler RbCrC.

## **Références bibliographiques :**

- [1] M. BELKHOUANE, Etude de premier principe des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des matériaux Heusler de type  $\text{Fe}_2\text{MnZ}$  ( $Z = \text{Al}, \text{Si}$ )  $\text{Fe}_2\text{MnAlO}$ . 5SiO. 5, 2016.
- [2] De Groot, R., RA de Groot, FM Mueller, PG van Engen, and KHJ Buschow, Phys. Rev. Lett. 50, 2024 (1983). Phys. Rev. Lett., 1983. 50: p. 2024.
- [3] Hohenberg, P. and W. Kohn, Inhomogeneous electron gas. Physical review, 1964. 136(3B): p. B864.
- [4] Kohn, W. and L.J. Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical review, 1965. 140(4A)

# **C***hapitre I*

**Généralité sur les  
Heusler**

## I.1.Introduction :

La spintronique est une nouvelle technologie qui utilise la charge électrique des électrons pour transmettre de l'information. Les travaux fondateurs de la spintronique concernent la Magnétorésistance Tunnel (TMR), découverte par Jullière en 1975[1], l'injection de courant polarisé en spin d'un matériau ferromagnétique vers un métal non-magnétique, observée par Johnson et Silsbee en 1985, et notamment, la Magnétorésistance Géante (GMR pour Géant Magnéto résistance) découverte par Fert. et *al.* En 1988 et Grunberg et *al.* en 1989 [2-4].

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

## I.2. Généralités sur les alliages d'Heusler

Depuis la découverte de la demi-métallicité ferromagnétique des alliages d'Heusler, ces derniers sont devenus un domaine d'intérêt de la recherche pour les applications de l'électronique de spin [5]. Le terme alliage d'Heusler est attribué à un groupe de composés qui contient à peu près **3000** composés identifiés. Ces composés remarquables ont été découverts la première fois par *Fritz Heusler* en 1903 tandis qu'il travaillait sur le ferromagnétisme de l'alliage  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  [6]. Grâce à un large éventail de propriétés, ces composés peuvent avoir le comportement de demi-métaux, de semi-conducteurs, de supraconducteurs et bien d'autres. Ils se divisent en deux groupes: les semi-Heusler avec une formule chimique XYZ et les alliages Heusler complets avec une composition  $\text{X}_2\text{YZ}$ , où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément des groupes III à V. D'autre terme les Heusler sont des composés ternaires qui se divisent en deux grandes familles : les « Half-Heusler », dont la formule générale est XYZ et les « Full-Heusler » dont la formule générale s'écrit  $\text{X}_2\text{YZ}$ . Ces alliages font partie d'une grande famille de part la multitude de compositions différentes possibles (**figure I.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 .I.1:** Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d’alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs

### I.3. Les types des alliages Heusler

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

#### I-3-1. Les alliages semi-Heusler (Half-Heusler)

Ces composés sont définis par la formule chimique  $XYZ$  avec une stœchiométrie (1 : 1 : 1), dans le cas général, ces alliages peuvent être compris comme des composés constitués de deux parties, une partie covalente et l’autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, alors que Z peut être considéré comme l’équivalent anionique [7, 8]. Les éléments X et Y peuvent être des éléments d’un groupe principal, des métaux de transition ou des éléments des terres rares. L’élément Z est un élément d’un groupe principal qu’il est plus électro-négatif comme le C, Ge, Sn, Sb.....

Les alliages semi-Heusler se cristallisent dans une structure cubique à faces centrées (groupe spatial numéro 216, F-43m) où deux éléments forment une structure NaCl et le troisième occupe quatre sites tétraédrique du réseau (1/4,1/4,1/4). Ce type de structure peut

être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées, dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z [9].

### I-3-2. Les alliages Heusler (Full-Heusler)

Ce type est connu par sa formule générale  $X_2YZ$  avec une stœchiométrie (2 : 1 : 1), où X et Y sont souvent des métaux de transition et Z est un élément non magnétique du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Dans des cas rarissimes, l'élément Y peut être remplacé soit par un élément des terres rares, soit par un métal alcalino-terreux. Ces composés se cristallisent dans la structure cubique dans le groupe d'espace cubique  $Fm\bar{3}m$  (groupe d'espace N° 225) [10], avec un prototype  $Cu_2MnAl$  noté souvent (L21). Dans ce prototype les atomes X occupent les sites tétraédriques  $(1/4, 1/4, 1/4)$ , les atomes Y se trouvent au niveau des sites octaédriques  $(1/2, 1/2, 1/2)$  et les atomes Z sont placés au sommet  $(0, 0, 0)$  et au centres des faces. Dans le cas où le numéro atomique de l'élément Y est supérieur à celui de l'élément X ( $Z(Y) > Z(X)$ ), une structure inverse et différente est observée. Souvent, cette structure inverse est désignée dans la littérature par X, avec le prototype  $CuHg_2Ti$ . Cette structure cristallisent dans le groupe d'espace cubique  $F\bar{4}3m$  (groupe d'espace N° 216).

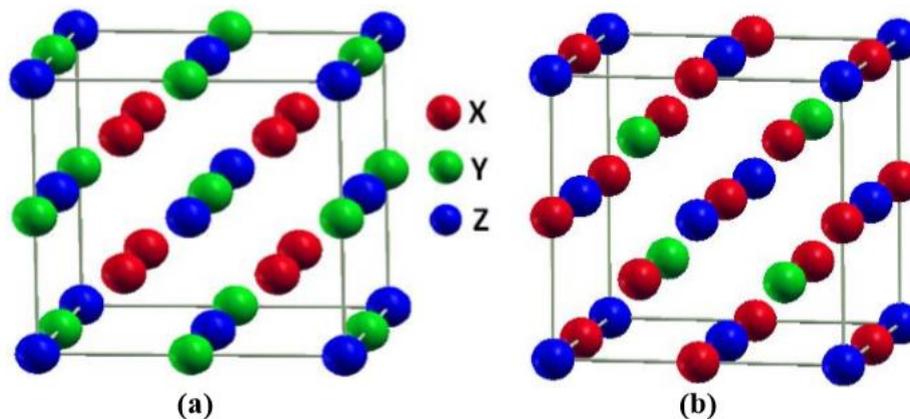
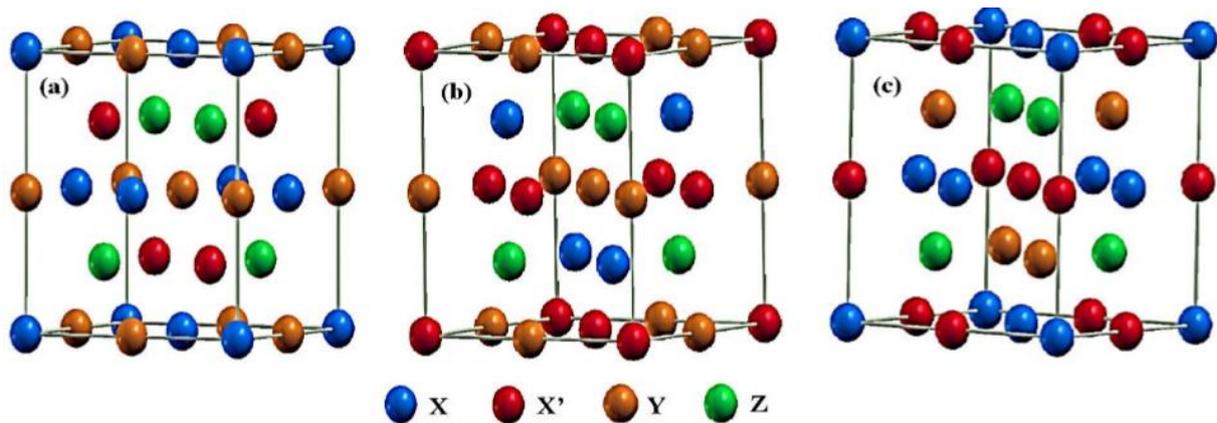


Figure I.2 : Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler) : a) régulière ; b) inverse.

### I.3.3. Les alliages Heusler quaternaires

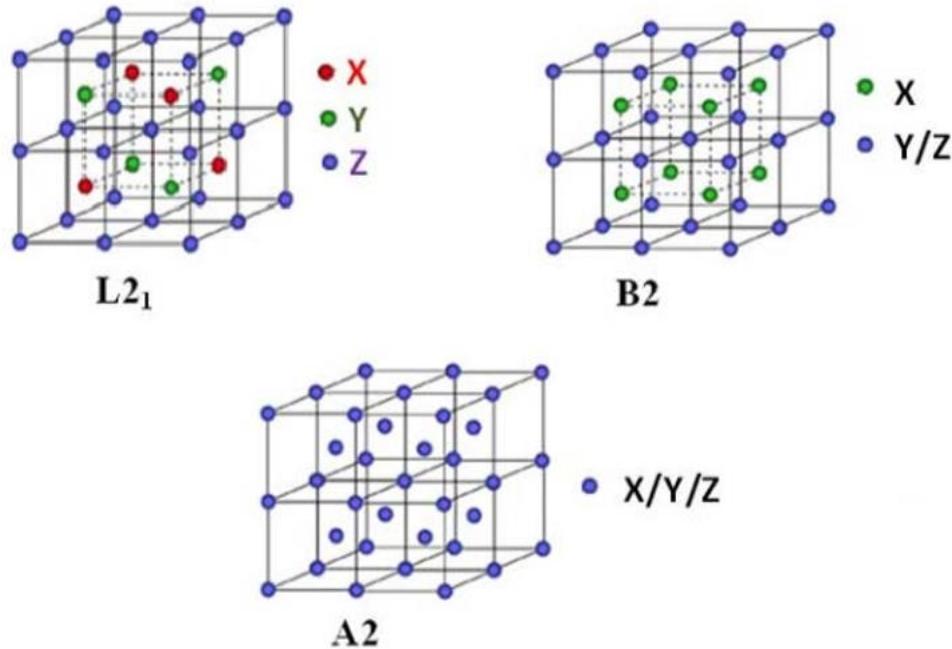
De nos jours, une autre famille d'alliages Heusler, la classe des alliages quaternaires de Heusler, a attiré une attention considérable pour l'application dans des dispositifs spintroniques [11]. Lorsque l'un des deux atomes X dans les composés  $X_2YZ$  (composés Heusler complets) est remplacé par un métal de transition différent  $X'$ , un composé quaternaire avec la composition  $XX'YZ$  peut désigner pour Heusler quaternaire, où X,  $X'$  et Y représentent des métaux de transition et Z représente les éléments de groupe principal.  $XX'YZ$  cristallise dans un  $LiMgPdSn$  (Figure I.3).



**Figure I.3 :** Illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles des composés Heusler quaternaires (a) type 1, (b) type 2 et (c) type 3

#### I.4. Structure cristalline des alliages Heusler

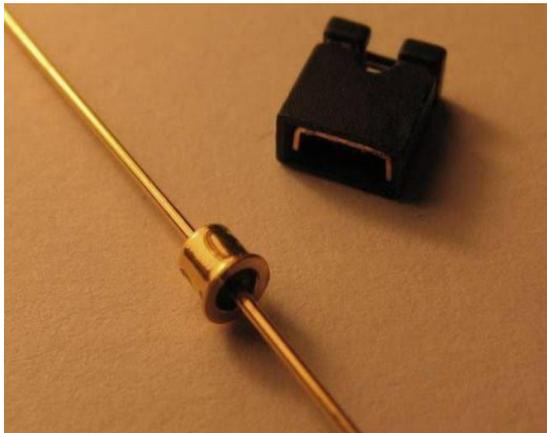
Les composés full Heusler ( $X_2YZ$ ) commandés avec la stœchiométrie 2: 1: 1 cristallisent dans la structure cubique à face centrée avec le prototype  $Cu_2MnAl$  (L21) qui appartient au groupe d'espace  $Fm\bar{3}m$  (225). Cette structure se compose de quatre sous-réseaux CFC interpénétrés (les atomes Y et Z ont 8 atomes X comme premiers proches voisins et l'atome X a 4 atomes Y et 4 atomes Z comme premiers proches voisins). Si l'atome Y est plus électronégatif que l'atome X, le composé se cristallise dans la structure prototype  $AgLi_2Sb$  qui appartient au groupe d'espace (216). Lorsque les atomes Y et Z sont localisés de manière aléatoire, la structure cristalline L21 de phase complètement ordonnée passe à la phase B2 partiellement désordonnée. Les sites Y et Z sont peuplés aléatoirement avec des atomes Y et Z ce qui donne une structure semblable à celle du CsCl. Quand les atomes X, Y et Z sont répartis aléatoirement parmi les sites atomiques, elle passe à la phase A2 complètement désordonnée (**Figure I.4**). Il a été rapporté en 2004 par l'équipe d'*A.J. Freeman* (Northwestern University, Chicago) que certains types de désordre peuvent conduire à des états supplémentaires au niveau de Fermi, réduisant ainsi la polarisation en spin ce qui va se répercuter sur les propriétés des composés [12].



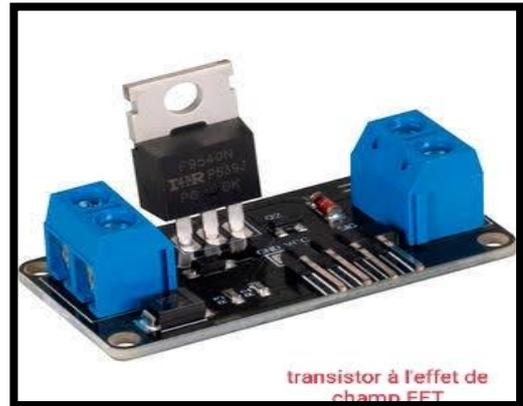
**Figure I.4:** Représentation schématique de la structure L21, B2 et A2 pour  $X_2YZ$

### I.5. Utilisations des alliages Heusler

Depuis leurs découvertes en 1903, les composés Heusler ont suscité un intérêt considérable en raison de leurs propriétés multiples dans divers domaines de technologie. Parmi ces propriétés qui ont contribué à la multiplication des travaux sur ces alliages, on note le caractère semimétallique [13] et la température de Curie élevée [14]. Ils présentent un ferromagnétisme semi-métallique (Half Metallic Ferromagnetism) et un gap énergétique dans une direction de spin au niveau de Fermi alors que l'autre direction est fortement métallique. Ceci résulte en une spin-polarisation des électrons de conduction. Ainsi, les HMFs ont un courant **100%** Spinpolarisé et peuvent être utilisés comme injecteurs de spin pour les mémoires magnétiques MRAM (Magnetic Random Access Memories) ainsi que d'autres dispositifs dont le fonctionnement dépend du spin comme les jonctions tunnel magnétiques [15]. Aussi, leurs bandes interdites peuvent être réglées entre **0** et **4** eV par la différence d'électronégativité des constituants, quand au magnétisme il peut être introduit dans ces composés en utilisant des éléments de terres rares, du manganèse ou un dopage électronique. Les problèmes actuels tels que la crise énergétique ou la pollution de l'environnement, accentuent l'activité de recherche dans le domaine de matériaux thermoélectriques nouveaux et de meilleure qualité [16]. Parmi les domaines d'utilisation des alliages Heusler autre que la spintronique on cite, l'optoélectronique [17], la supraconductivité [18], la mémoire à forme magnétique [19].



**Figure I.5.** Diode tunnel magnétique à base d'alliage Heusler



**Figure I.6.** Transistor à l'effet de champ.

## I.6. Le magnétisme et les alliages Heusler

Le magnétisme résulte d'un ensemble des moments magnétiques de spins couplés entre eux par des interactions d'échange, lorsque l'énergie d'échange est supérieure à l'activation thermique et selon son signe, on observe un ordre ferromagnétique, antiferromagnétique ou ferrimagnétique. La majorité des composés full Heusler présentent un caractère ferromagnétique tandis que certains d'autres présentent un caractère antiferromagnétique.

En 1903, Heusler annonçait la découverte d'un matériau ferromagnétique à température ambiante formé à partir des éléments, Cu, Mn et Al qui ne montrent aucun magnétisme à température ambiante. Plus tard, le ferromagnétisme a été trouvé dans d'autres composés formés à partir de Cu et Mn mais avec plusieurs autres éléments  $Z = \text{Sb}; \text{Bi}; \text{Sn}$ .

Aujourd'hui, cela ne semble peut-être pas surprenant d'autant plus que les concepts d'antiferromagnétisme et de ferrimagnétisme ont été introduits par *Louis Néel* dans les années 1930-1940 [20, 21]. Des recherches sur les phases Heusler des alliages  $X_2\text{MnZ}$ , où  $X = \text{Ni}; \text{Pd}; \text{Au}$  et  $Z = \text{Al}; \text{Si}; \text{Ga}; \text{Ge}; \text{In}; \text{Sn}; \text{Sb}$ , ont été menées avec un accent particulier sur leurs ordres chimiques, magnétiques et de transition qui peut être induit par la composition, la température ou la pression [22, 23].

*Webster* et ses collaborateurs ont été les premiers à explorer les propriétés magnétiques des composés  $\text{Co}_2\text{MnZ}$ , qui étaient très différents des Heuslers précédemment étudiés, car ils incorporent des éléments autres que Mn qui portent un important moment magnétique local [24]. Les composés Heusler à base de  $\text{Co}_2$  ont fait l'objet d'une attention particulière dans le

contexte du ferromagnétisme semi-métallique (HMF). Les ferromagnétiques semi métalliques, présentent un comportement métallique dans un canal de spin et un comportement isolant dans l'autre et présentent donc un grand intérêt car ils devraient intrinsèquement avoir des états électroniques polarisés en spin à l'énergie de Fermi [25]. Le premier Heusler HMF a été réalisé par de Groot et al., pour le cas du NiMnSb [26]. De tels matériaux ont un grand intérêt pour les applications spintroniques, tel que leurs utilisations en tant qu'électrodes magnétiques dans des jonctions tunnel magnétiques.

La jonction tunnel magnétique est composée de deux électrodes magnétiques séparées par une fine barrière tunnel. Le courant traversant la barrière du tunnel d'une électrode à l'autre dépend de la configuration magnétique des électrodes. Lorsque les électrodes sont alignées parallèlement l'une à l'autre, le courant peut se produire mais lorsque les moments des deux électrodes sont alignés d'une manière antiparallèles, le courant tunnel sera réduit et dans le cas des HMF, devrait aller à zéro.

### **I.7. Spintronique**

La spintronique ou l'électronique de spin est une discipline issue de la rencontre de l'électronique et du magnétisme, elle a vu le jour en 1988 grâce à la découverte de la magnétorésistance géante (GMR). Les applications de l'électronique de spin nécessitent des matériaux combinant des propriétés magnétiques et des propriétés de transport électronique [27]. Elle est une nouvelle branche dans la recherche en nanotechnologie, qui est la combinaison de trois supports d'information : la charge de l'électron, le spin de l'électron et le photon [28,29]. Ces trois supports représentent trois branche différente de la technologie d'information et communication (TIC), traitement des données avec le transport des électrons, stockage d'information avec l'assemblage des spins et enfin le transfert des données avec les connections d'optique.

#### **I.7.1. Domaine d'application de la spintronique**

L'application de la spintronique la plus utilisée industriellement et c'est ce que l'on appelle une vanne de spin. En prenant les applications principales :

- Les disques durs actuels : c'est le premier fait d'arme de la spintronique.
- Des capteurs très sensibles : c'est un domaine d'application évident.

- MRAM : (Magnetic Random Access Memory) C'est le paradis de la spintronique en raison du progrès intrinsèque qu'elle apporte, comme du volume colossal du marché que représentent les mémoires.
- Les composants radiofréquence : c'est un domaine que l'électronique du spin va bouleverser. En effet, la spintronique se prête à réaliser des circuits résonnants se comportant comme une antenne [30].



**Figure I.7.** Une mémoire MRAM.



**Figure I.8.** Un Disque Dur.

**Références bibliographiques**

- [1] F.Heusler. Verh. d. DPG, 5: 219 (1903).
- [2] K.Endo, T.Ohoyama, and R.Kimura.. Journal of the Physical Society of Japan, 19: 1494–1495 (1964).
- [3] L.Ritchie, G.Xiao, Y.Ji, T.Y.Chen, C.L.Chien, M.Zhang, Phys Rev B 68, 104330 (2003).
- [4] Y.Nishino, M.Kato, S.Asano, K.Soda, M.Hayasaki, U.Mizutani, Phys Rev Lett 79,1909 (1997).
- [5] S. Trudel, O. Gaier, J. Hamrle, and B. Hillebrands, “Magnetic anisotropy, exchange and damping in cobalt-based full-Heusler compounds: an experimental review,” J. Phys. Appl. Phys., vol. 43, no. 19, p. 193001, May (2010).
- [6] F. Heusler, “Über magnetische Manganlegierungen,” Verhandlungen Dtsch. Phys. Ges, vol. 5, p. 219, (1903).
- [7] H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [8] H. ZENASNI, « Etude théorique des propriétés magnétique électronique et structurales des alliages Heusler », Université de Tlemcen, Thèse (2013).
- [9] P. J. Webster, K. R. A. Ziebeck, Landolt-Börnstein - group III condensed matter, vol. 19C. Berlin: Springer; 19 (1988) 75-184.
- [10] M. Puselj, Z. Ban, Croat Chem Acta 41 (1969) 79.
- [11] Yan, P.-L., et al., The structural, electronic, magnetic and mechanical properties of quaternary Heusler alloys ZrTiCrZ (Z= Al, Ga, In, Si, Ge, Sn): a first-principles study. Journal of Physics D: Applied Physics, 2016. 49(25): p. 255002.
- [12] Ma, J., et al., New Half-Metallic Materials: FeRuCrP and FeRhCrP Quaternary Heusler Compounds. Materials, 2017. 10(12): p. 1367.
- [13] Gao, Y. and X. Gao, The half-metallicity of LiMgPdSn-type quaternary Heusler alloys FeMnScZ (Z= Al, Ga, In): A first-principle study. AIP Advances, 2015. 5(5): p. 057157.
- [14] F.Heusler. Z.Anorg. Allg. Chem, 161,159 -160 (1927).
- [15] H.C.Kandpal, C.Felser, and R.Seshadri. J Phys. D: Appl. Phys., 39(5), 776 (2006).
- [16] O.Guillon, J.G.Julian, B.Dargatz, T.Kessel, G.Schierning, J.R.Athel, and M.Herrmann.. Advanced Engineering Materials, 16(7) ,830- 849(2014).
- [17] L.Andrea, Modélisation du transport thermique dans des matériaux thermoélectriques, Thèse de Doctorat en physique Paris VI. (2016).
- [18] X.L.Wang, X.S.Dou, and C.Zhang. NPG Asia Mater., 2(1) 31(2010).
- [19] S.Wurmehl, G.H.Fecher, H.C.Kandpal, V.Ksenofontov, C.Felser, H.J.Lin, Appl Phys Lett 88, 032503 (2006).
- [20] C.Felser, B.Heitkamp, F.Kronast, D.Schmitz, S.Cramm, H.A.D`urr, H.J.Elmers, G.H.Fecher, S.Wurmehl, T.Block, D.Valdaitsev, S.A.Nepijko, A.Gloskovskii, G.Jakob, G.Schonhense, and W.Eberhardt. J. Phys.: Condens. Matter, 15: 7019 - 7027 (2003).
- [21] F.Casper, T.Graf, S.Chadov, B.Balke and C.Felser, Half-Heusler compounds: novel materials for energy and spintronic applications, Semiconductor Science and Technology, 27(6) (2012).

- [22] P. Debye, Ann. Phys. 39 (1912) 789.
- [23] A.T. Petit, P.L. Dulong, Ann. Chim. Phys. 10 (1819) 395.
- [24] L.Néel, Propriétés magnétiques de l'état magnétique et énergie d'interaction entre atomes magnétiques. Ann. de Phys. 5: 232-279 (1936).
- [25] L.Néel, Some new results on antiferromagnetism and ferromagnetism. Rev. Mod. Phys. 25:58-63(1953).
- [26] P.J.Webster, R.S.Tebble, The magnetic and chemical ordering of the Heusler alloys Pd<sub>2</sub>MnIn, Pd<sub>2</sub>MnSn and Pd<sub>2</sub>MnSb. Phil. Mag. 16: 347-361 (1967).
- [27] D.P.Morris, R.P.Preston, I.Williams, Search for new Heusler alloys. Proc. Phys. Soc. 73: 520 (1959).
- [28] P.J.Webster, Magnetic and chemical order in Heusler alloys containing cobalt and manganese. J. Phys. Chem. Solids 32:1221-1231(1971).
- [29] C.Felser, G.Fecher, B.Balke, Spintronics: A challenge for materials science and solid-state chemistry. Angewandte Chemie International Edition 46:668-699 (2007).
- [30] R.A de Groot, F.M.Mueller, P.G.van Engen, K.H.J.Buschow, New class of materials: Half-metallic ferromagnets. Phys. Rev. Lett. 50:2024-2027 (1983).

# **C***hapitre II*

**Calcul Numérique**

## II. 1 Introduction

Au début du XXème siècle, les lois de la mécanique classique ont atteint leurs limites quant à la description du comportement des particules microscopiques telles que les électrons, les noyaux ou les molécules, ce qui a donné naissance à l'ère de la mécanique quantique du fait que ses lois permettent de décrire les propriétés des particules microscopiques. Toutefois, il fallait mettre en place les formalismes mathématiques permettant de résoudre les équations de la mécanique quantique.

Dans ce premier chapitre, nous présentons les formalismes les plus utilisés :

- L'équation de Schrödinger et les approximations permettant de la résoudre
- La théorie fonctionnelle de la densité « DFT » et les formalismes permettant le traitement de l'énergie d'échange et de corrélation.
- Les méthodes de calcul des structures de bandes d'énergie.
- Code Wien2k.

### II.1.1 Équation de Schrödinger

Le point de départ pour étudier les propriétés électroniques des matériaux d'un point de vue théorique est la résolution de l'équation de Schrödinger, c'est l'équation fondamentale à résoudre et de décrire la structure électronique d'un système à plusieurs noyaux et électrons, établie par Erwin Schrödinger (1887-1961) en 1925 [1]. Les solides sont constitués par une association de particules élémentaires : les ions (noyaux) lourds de charge positive et les électrons légers de charge négative. Le problème général est d'essayer de calculer toutes les propriétés de ces particules (ions + électrons) à partir des lois de la mécanique quantique, à l'aide de l'équation de Schrödinger [2]:

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

Où  $\Psi$  est la fonction d'onde du système, fonction des coordonnées des noyaux et des électrons, contient toute l'information du système.  $\hat{H}$  est l'opérateur Hamiltonien.  $E$  est l'énergie propre du système dans l'état considéré. Hamiltonien exact du cristal non relativiste résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction soit répulsion ou attraction suivant la charge des particules (noyaux, électrons) s'écrit comme suite:

$$\hat{H} = \mathbf{T}_n + \mathbf{T}_e + \mathbf{V}_{e-n} + \mathbf{V}_{e-e} + \mathbf{V}_{n-n} \quad (\text{II.2})$$

Cependant, l'équation de *Schrödinger* dans cette forme est trop complexe pour être résolue analytiquement, elle n'est possible que pour les systèmes hydrogénoïdes. Ainsi, différents niveaux d'approximations doivent être envisagés. Les trois niveaux principaux de simplification généralement utilisés sont :

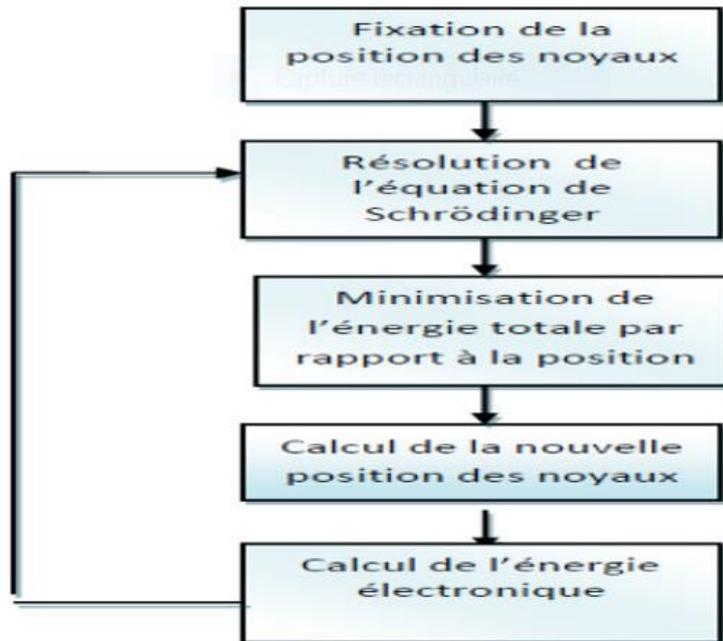
- ✓ L'approximation de Born Oppenheimer (premier niveau d'approximation).
- ✓ L'approximation de Hartree Fock ou le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (deuxième niveau d'approximation).
- ✓ Les approximations inhérentes à la résolution des équations (troisième niveau d'approximation).

## II.2. Approximation de Born-Oppenheimer

Selon Born-Oppenheimer (Max Born (1882-1970) et Robert Oppenheimer (1904-1967)), le traitement des électrons et des noyaux d'une façon séparée est la seule possibilité qui permet la simplification de ce problème et la résolution de l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire une partie nucléaire et une partie électronique. Cette approximation est basée sur l'approximation adiabatique connue sous le nom « approximation adiabatique de BO » [3] qui repose sur la grande différence de masse entre les électrons et les noyaux [4]. Les noyaux sont très lourds par rapport aux électrons (environ **2000** fois) ainsi les électrons peuvent se déplacer dans le solide beaucoup plus rapidement que les noyaux. Donc, le mouvement des noyaux est négligeable alors leur énergie cinétique est nulle et l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux devient constante [5]. Cette approche conduit à un Hamiltonien pour lequel les électrons se déplacent dans un champ créé par une configuration statique des noyaux [6].

Ainsi l'Hamiltonien du système dans l'équation (II.2) s'écrit de la forme :

$$\hat{H}_{el} = T_e + V_{e-n} + V_{e-e} \quad (II.3)$$



**Figure II.1** : Mise en œuvre d'algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer.

La complexité du problème est réduite, mais la solution de l'équation (II.1) reste toujours difficile. Il faut faire d'autres approximations pour résoudre ce problème [8].

### II.3. Approximation de Hartree et de Hartree-Fock

L'équation (II.1) ne peut-elle non plus être résolue à moins de la réduire à une équation concernant une seule particule, il faut donc trouver un moyen qui permettrait de tenir en compte des interactions entre les électrons. Tout en substituant un système d'électron indépendant à un système d'électrons en interaction [9]. Dans l'approximation de Hartree [10], On considère les électrons comme indépendants, dans lequel chaque électron se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons, désignant par l'énergie potentielle de l'électron dans ce champ, à chaque électron correspond une orbitale et la fonction d'onde totale s'écrit comme un produit de fonction d'onde monoélectronique, de sorte que [11] :

$$\Psi = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \Psi_3(r_3) \dots \dots \Psi_n(r_n) \quad (\text{II.4})$$

L'approximation de Hartree-Fock permet de réduire le problème de N corps à un problème d'un seul corps, ou chaque électron soumis à un potentiel effectif généré par les autres électrons. Notamment pour les systèmes du plusieurs électrons le calculs doit être difficiles, pour cela on recourt à la théorie de la fonctionnelle de la densité.

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

L'approche de la DFT (Density Functional Theory) permet d'atteindre une bonne précision de calcul, pour une taille réaliste du système. L'idée principale de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est que l'énergie d'un système d'électrons peut être exprimée en fonction de la densité électronique  $\rho(r)$ . Pour un système de N électrons,  $\rho(r)$  correspond à la densité électronique au point de l'espace  $r$  [12]. La DFT est basée sur deux théorèmes fondamentaux introduits par Hohenberg et Kohn et ensuite étendus par Kohn et Sham [13, 14].

### II.4.1. La méthode de Thomas-Fermi

Le principe fondamental de la DFT consiste à mesurer l'énergie d'un système électronique en fonction de sa densité électronique  $\rho$ , définie sur l'espace commun  $R^3$ . Il s'agit en réalité d'un concept ancien, principalement issu des travaux de Thomas [15] et Fermi [16]. Ce modèle présente l'avantage de ne pas dépendre des trois coordonnées spatiales des électrons du système étudié pour sa densité.

Ce modèle présentait quelques lacunes, car en termes quantitatifs, il ne décrivait pas correctement les caractéristiques des molécules et des solides. La méthode de détermination de la densité de l'état fondamental, appelée DFT, a été développée par Slater, Hohenberg et Kohn. La DFT a la capacité de résoudre divers types de problèmes et d'être assez précise.

### II.4.2. Équations de Kohn et Sham

L'approche de Kohn et Sham (publiée en 1965) [17,18] propose de remplacer un système (gaz d'électrons) en interaction qui est impossible de le résoudre par un autre équivalent fictif où les particules évoluent dans un potentiel effectif (ces particules n'interagissent pas). Ce nouveau système a la même densité  $\rho(r)$  que le système réel (en interaction) :

$$\rho(r) = \sum_i |\Psi(r)|^2 \quad (\text{II.5})$$

L'intérêt de la formulation induit par Kohn et Sham, est qu'on peut définir un hamiltonien mono-électronique et écrire les équations de Kohn et Sham mono-électronique qui peuvent être résolues analytiquement [19].

La fonctionnelle de Kohn-Sham s'écrit :

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

Avec  $T_{KS}$  est l'énergie cinétique et  $E_H$  l'énergie d'Hartree selon les expressions suivantes:

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

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

Donc l'équation de Schrödinger à résoudre dans le cadre de l'approche de Kohn et Sham de façon cohérente est de la forme :

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

Les particules fictives subissent un potentiel effectif qui est défini par la sommation de trois potentiels:

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

$V_H$  : indique le terme de Hartree (interaction coulombienne classique entre les électrons) :

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

$V_{xc}$  : une fonctionnelle dite "énergie d'échange et de corrélation" décrivant l'interaction inter-électronique selon l'expression :

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

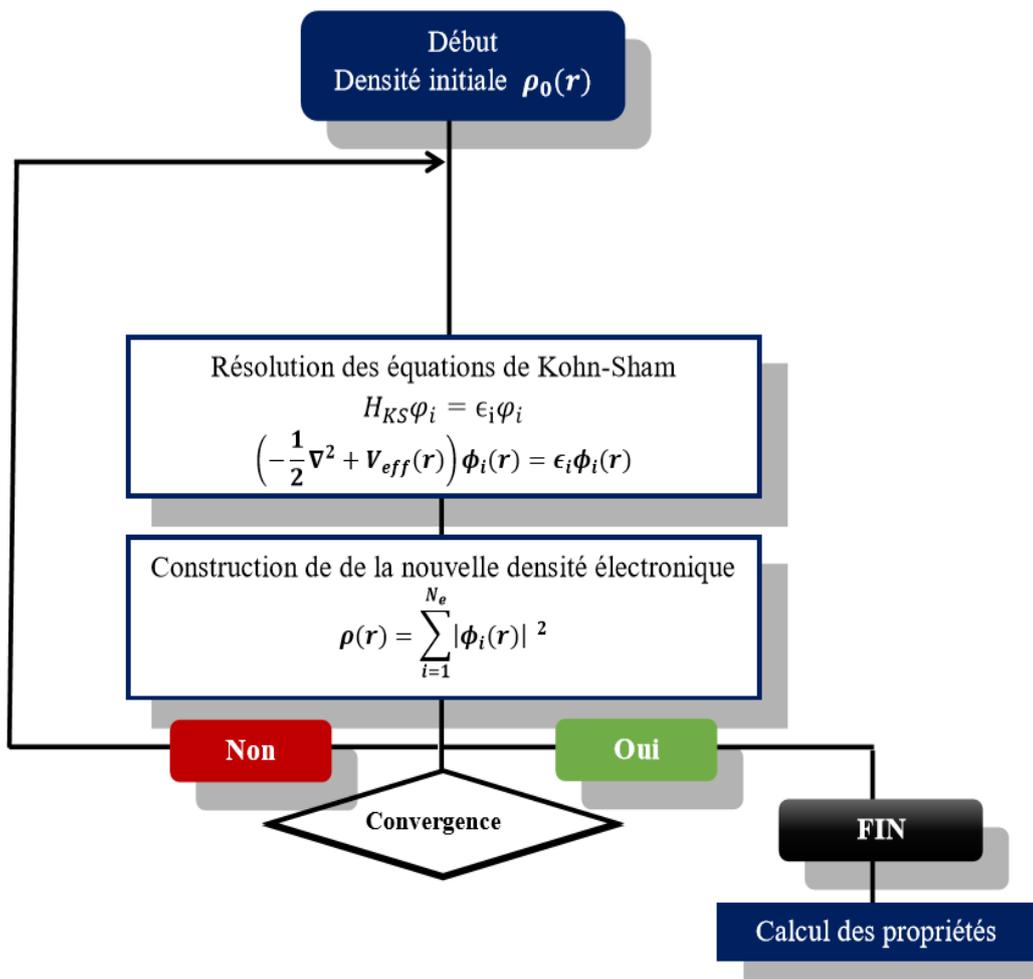
$V_{ext}$  : est un terme qui inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

Le problème qui se pose pour les équations de Kohn et Sham, est que la résolution de ces équations reste impossible puisque la forme analytique du potentiel  $V_{xc}$  est inconnue, ce qui conduit à introduire certaines approximations [20].

### II.4.3 Résolution des équations de Kohn-Sham

Pour déterminer l'état fondamental du système revient alors à résoudre les équations de Kohn-Sham, de manière auto-cohérente (ou Self-Consistent Field SCF), l'ensemble de ces équations aux valeurs propres. Où on injecte une densité de départ dans le cycle autocohérent pour calculer les fonctionnelles de la densité initiale, on calcule  $V_{eff}(r)$  avec l'équation (II.9) comme deuxième étape, cette dernière nous permet de résoudre l'équation différentielle (II.8) pour  $\Psi_i$ , dans la dernière procédure, les solutions  $\Psi_i$  sont réinjectées dans l'équation (II.4) pour calculer une nouvelle densité qui nous permet de calculer un nouveau potentiel  $V_{eff}(r)$ . La procédure itérative continuée jusqu'à ce que la convergence soit atteinte.

Les procédures sont regroupées dans le diagramme ci-dessous.



**Figure II.2:** Processus d'itération auto-cohérente utilisé pour résoudre les équations de Kohn Sham.

## II.5. Traitement de l'échange et de corrélation

La partie d'échange nous informe sur le gain en énergie coulombienne due au respect du principe d'exclusion de Pauli, tandis que la corrélation correspond au juste équilibre entre le gain en énergie coulombienne et le coût en énergie cinétique lorsque deux électrons de même spin sont séparés. La qualité de la théorie de la fonctionnelle de la densité repose sur la précision de la description du potentiel d'échange-corrélation. Historiquement, c'est l'approximation de la densité locale (LDA pour Local Density Approximation en anglais) qui apporte les premiers résultats concluants.

### II.5.1. Approximation de la densité locale (LDA)

La première approximation qui a été proposée en 1965 par Kohn et Sham est celle de la densité locale (LDA) [21]. Pour un gaz homogène la densité est égale à  $n/V$ , le nombre de particules sur le volume qui est une constante. Ainsi, en un point  $r$  auquel correspond une densité  $\rho(r)$ , sera associé un potentiel d'échange et corrélation comparable à celui d'un gaz d'électrons de même densité  $\rho(r)$ . L'énergie d'échange et de corrélation s'écrit en fonction de l'énergie d'échange et de corrélation par particule de la forme suivante :

$$\mathcal{E}_{xc} [(\rho)] = \mathcal{E}_h[\rho(r)] \quad (\text{II.13})$$

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \mathcal{E}_{xc}^{hom}[\rho(r)] d^3r \quad (\text{II.14})$$

•  $\mathcal{E}_{xc}^{hom}[\rho(r)]$  est l'énergie d'échange et de corrélation d'un gaz homogène d'électrons de densité constante est égale à sa valeur en  $r$ . Cet approximation est à la base de toutes les fonctionnelles d'échange-corrélation modernes ; il nous faut de présenter une forme algébrique à  $E_{xc}$  qui permettant de prendre en compte de façon satisfaisante les corrélations entre les mouvements des différents électrons. C'est la fonctionnelle pour laquelle une forme exacte est presque connue, l'approximation LDA est basée sur le modèle du gaz d'électron uniforme où le terme  $\mathcal{E}_{xc}^{hom}[\rho(r)]$  indique l'énergie d'échange-corrélation par particule du gaz d'électron uniforme de densité  $[\rho(r)]$  de plus elle être considérée comme la somme d'une contribution d'échange et de corrélation :

$$\mathcal{E}_{xc}^{hom}[\rho(r)] = \mathcal{E}_x(\rho(r)) + \mathcal{E}_c(\rho(r)) \quad (\text{II.15})$$

- $\mathcal{E}_x(\rho(r))$  est la fonctionnelle d'échange et  $\mathcal{E}_c(\rho(r))$  est la fonctionnelle de corrélation.

### II.5.2. Approximation du gradient généralisé (GGA)

Afin de parvenir à combler les insuffisances citées ci-dessus pour la LDA et la LSDA et améliorer leurs résultats, une nouvelle correction a été introduite par l'ajout du gradient de la densité, c'est l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) [22,23]. En gardant la même expression de la LDA, cette approximation revient à considérer le terme d'échange et de corrélation  $\epsilon_{xc}$  non plus comme une fonction uniquement de la densité mais dépend également de l'amplitude de son gradient, donc elle dépend de la densité dans les volumes voisins afin de représenter les régions où les fluctuations sont importantes, de manière plus générale comme une fonction de la densité et de sa variation locale, L'énergie s'écrit donc :

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

Une telle approximation est plus efficace pour des systèmes dans lesquels la densité électronique varie fortement.

### II.6. Code WIEN2K :

Le code WIEN2k basé sur la méthode FP-LAPW est un programme de calcul de la structure électronique des solides. Il a été développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwartz. 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 [24-26]. Les différents programmes indépendants que comprend le code WIEN2K sont liés par le C-SHELL SCRIPT. Ils peuvent être exécutés en utilisant soit une architecture séquentielle ou parallèle. La procédure de calcul passe par trois étapes :

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

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

- **LSTART** : il permet de générer les densités atomiques ; il détermine comment les différentes orbitales atomiques sont traitées dans le calcul de la structure de bande.
- **SYMMETRY** : il permet de générer les opérations de symétrie du groupe spatial et déterminer le groupe ponctuel des sites atomiques individuels.
- **KGEN** : il génère le nombre de points k dans la zone de Brillouin.
- **DSART** : il génère une densité de départ pour le cycle auto-cohérent (le cycle SCF) par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

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

Les sous programmes utilisés sont :

- **LAPW0**: Génère le potentiel à partir de la densité.
- **LAPW1**: Calcule les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.
- **LAPW2**: Calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.
- **LCORE**: Calcule les états du cœur et les densités.
- **MIXER**: Mélange les densités d'entrée et de sortie.

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

**Références bibliographiques :**

- [1] P. Blaha and K. Schwarz, Int. J. Quantum Chem. 23, (1983) 1535.
- [2] E. Schrödinger, « An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules ». Phys. Rev. vol. 28, (1926), p. 1049-1070.
- [3] P.Hohenberg and W.Kohn, phys.Rev.136, B864(1964)
- [4] W.Kohn L.J.Sham, Phys.Rev .136, B1133 (1965)
- [5] E. Wigner, Phys. Rev. 46, 1001 (1934).
- [6] D. M. Ceperly and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).
- [7] I. ABDELLAOUI, « Etude du magnétisme dans les oxydes métalliques : TiO<sub>2</sub> et HfO<sub>2</sub> », Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, Mémoire de Magister, 2011.
- [8] D.R.Hartree, Proc.Combridge Philos.Soc.24, 89(1928).
- [9] J.E. Enderby, A.C. Barnes, Rep. Prog. Phys.53 (1990) 85.
- [10] B. E. Mellander, Phys. Rev. B 26, (1982) 5886.
- [11] K.Hamar.Etude «ab initio» des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des couches d'alliages FePt L10, mémoire de master academique, Université de MOULOU MAMMERI,Tizzi Ouezzo.
- [12] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev. 1, 36, B 864 (1964).
- [13] W. Kohn et L.J Sham, Phys. Rev. 140, A1113 (1965).
- [14] L.H. Thomas, Proc. Cambrige Philos. Soc. 23, 542 (1927).
- [15] E. Fermi, Z. Phys. Rev. 53, (1951).
- [16] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A (1965) 1133.
- [17] H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [18] I. ABDELLAOUI, « Etude du magnétisme dans les oxydes métalliques : TiO<sub>2</sub> et HfO<sub>2</sub> », Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, Mémoire de Magister, 2011.
- [19] A. BOUDALI, « Etude des propriétés structurales élastiques électroniques et optiques des pérovskites cubiques LaAlO<sub>3</sub> et XTiO<sub>3</sub> (X= Ca, Sr, Pb) », Université d'Oran, Thèse doctorat, 2011.
- [20] N. M. Harrison, Computational Materials Science, 45, (2003).
- [21] S.H. Vosko. L. Wilk, M. Nussair , Can. J. Phys. 58, 1200, (1980).
- [22] J.P. Perdew, Elec. Struct. Solids. 17, 11, (1991).

- [23] A. BOUDALI, « Etude des propriétés structurales élastiques électroniques et optiques des pérovskites cubiques  $\text{LaAlO}_3$  et  $\text{XTiO}_3$  (X= Ca, Sr, Pb) », Université d'Oran, Thèse doctorat, 2011
- [24] B. Kohler, P. Ruggerone, S. Wilke, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* 74, 1387(1995).
- [25] K., C. Schwarz, Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, Charge distribution and electric field gradients in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . *Physical Review B*, 42(4) 2051-2061 (1990)
- [26] B.Winkler, P. Blaha, and K. Schwarz, Ab-initio calculation of electric-field gradient tensors of forsterite. *American Mineralogist*, 81 545-549 (1996).

# **C***hapitre III*

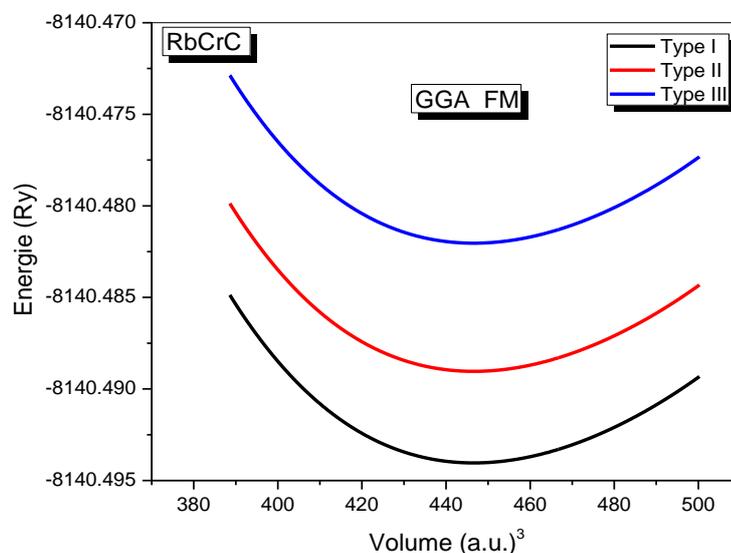
**Résultats et discussion**

### III.1 Introduction

Une nouvelle classe d'alliages semi-Heusler (HHA) contient les éléments de métaux de transition ont récemment été signalés où le magnétisme provient principalement des électrons de l'anion d. Des nombreux chercheurs ont déterminé la demi-métallicité dans les alliages semi-Heusler XYZ tels que Rozale et al. [1,2] et autres ont exploré le comportement magnétique du semi-Heusler XYZ [3,4]. Nous cherchons à poursuivre la recherche de nouveaux matériaux (HM) avec de moment magnétique et une polarisation de spin élevée, tel que le composé semi-Heusler RbCrC. Dans ce chapitre notre objectif principal est d'étudier les propriétés physiques, notamment le caractère HM, les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques de composé RbCrC pour des applications potentielles en spintronique.

### III.2 Propriétés structurales

La détermination des propriétés structurales est une première étape fondamentale dans tout calcul, leur détermination nous donne plus d'informations sur les propriétés du matériau à étudier, et ceci avant d'accéder aux autres propriétés physiques (électroniques, magnétiques). La structure d'un matériau demi Heusler peut être caractérisée par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc). Les propriétés structurales de l'état fondamental du matériau Heusler ont été déterminées via le fit de l'énergie totale de notre cristal en fonction du volume schématisé sur la **figure III.2**. Pour notre composé, la configuration de type I dans la phase ferromagnétique (FM) devrait être l'état le plus stable d'où la courbe E (V) présente un minimum.



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

Les paramètres structuraux obtenus à l'équilibre statique (0K et 0GPa) pour le type I sont présentés dans le **tableau III.1**. Nous avons également calculé l'énergie de formation ( $E_f$ ), qui correspond au changement d'énergie lorsqu'un matériau est formé à partir de ses éléments constitutifs dans leur état global.  $E_f$  par unité de formule de composé RbCrC est donné par la relation [5] :

$$E_f^{RbCrC} = E_{tot}^{RbCrC} - (E_{bulk}^{Rb} + E_{bulk}^{Cr} + E_{bulk}^C) \quad (\text{III. 1})$$

Où  $E_{tot}^{RbCrC}$  est l'énergie totale d'équilibre;  $E_{bulk}^{Rb}$ ;  $E_{bulk}^{Cr}$  et  $E_{bulk}^C$  sont les énergies totales des composants atomiques dans la structure en vrac.

$$E_c^{RbCrC} = (E_{atom}^{Rb} + E_{atom}^{Cr} + E_{atom}^C) - E_{tot}^{RbCrC} \quad (\text{III. 2})$$

Où  $E_{tot}^{RbCrC}$  est l'énergie totale du matériau;  $E_{atom}^{Rb}$ ;  $E_{atom}^{Cr}$  et  $E_{atom}^C$  sont les énergies totales des atomes libres.

**Tableau III. 1 :** Le paramètre de réseau  $a$  ( $\text{Å}$ ), le module de compressibilité  $B$  (GPa), sa première dérivée de pression  $B'$ , l'énergie  $E_c$  (eV), l'énergie de formation  $E_f$  (eV) et l'énergie totale minimale  $E_0$  (Ry).

Composé	$a$ ( $\text{Å}$ )	$B$ (GPa)	$B'$	$E_c$ (eV)	$E_f$ (eV)	$E_0$ (Ry)
RbCrC	6.42	26.70	4.10	0.82	-0.75	-8140.494058

D'après les résultats présentés dans le Tableau III.1, on remarque que les valeurs négatives et positives obtenues pour  $E_f$  et  $E_c$ , respectivement, confirment la stabilité thermodynamique du composé étudié dans la structure cubique  $C_{1b}$  (fcc) [6,7]. Nous concluons donc que ce composé pourrait être synthétisé expérimentalement. À notre connaissance, aucune donnée expérimentale ou théorique n'est disponible pour comparaison, les résultats présents seront donc utiles pour des recherches futures.

### III.3 Propriétés électroniques

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

#### III.3.1 Structure de bandes

Dans cette partie, nous nous concentrons principalement sur la structure de bande électronique polarisée en spin de composé RbCrC le long de la direction hautement symétrique de la zone de Brillouin (BZ), dans laquelle les niveaux d'énergie de Fermi ( $E_F$ ) étaient mis à zéro (Fig.III.2).

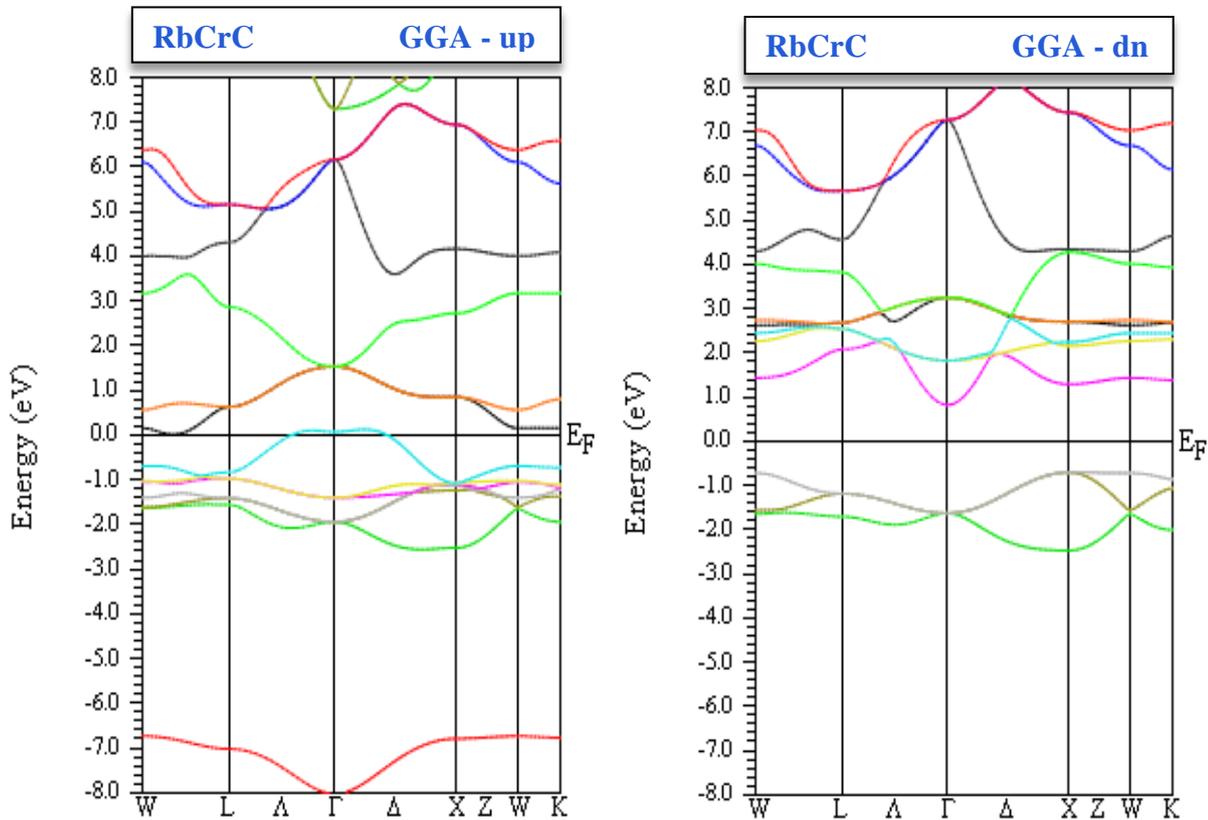


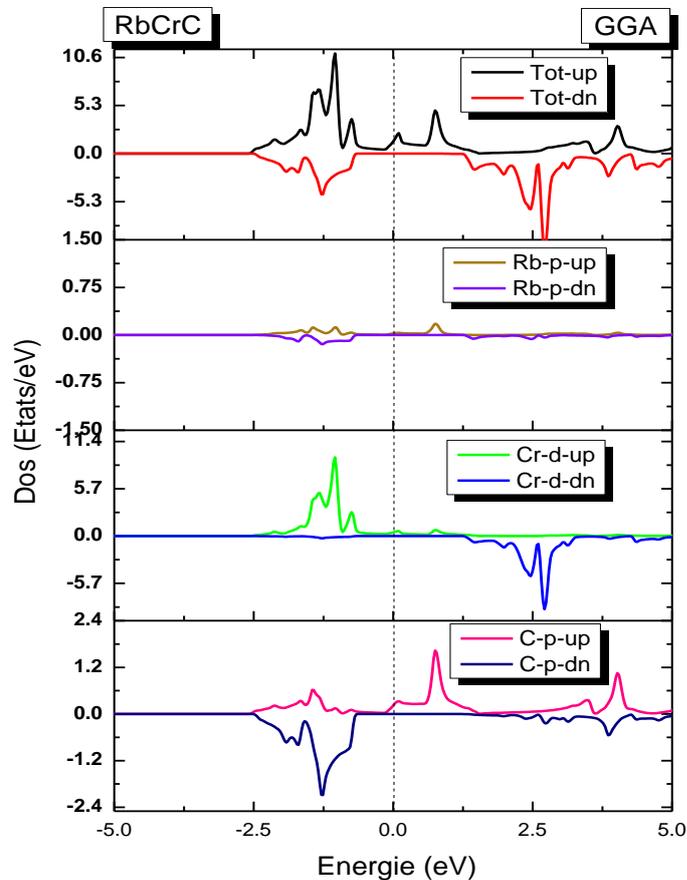
Figure III.2: Structure de bande du RbCrC (up/dn) obtenue par GGA-PBE.

Dans le canal à spin minoritaire (spin-down), la bande interdite indirecte (BII) autour du niveau de Fermi ( $E_F$ ) le long de la symétrie  $\Gamma$ -X est de 1.84 eV pour RbCrC. Cela indique que cette structure électronique a un caractère purement semi-conducteur, tandis que les spins majoritaires (spin-up) présente un comportement métallique. Ce résultat conduit à une polarisation de spin de 100 % à  $E_F$  pour ce matériau, ce qui confirme que cet alliage est typiquement ferromagnétique demi-métallique (FM-DM) par GGA.

### III.3.2 Densité d'états (DOS)

La densité d'état est une grandeur physique importante pour la compréhension des propriétés du matériau à étudier [8], elle sert à préciser les types des orbitales qui contribuent au transport électrothermique, mais aussi a calculé la distribution d'énergie des électrons dans la bande de

valence ainsi que la bande de conduction [9]. Ces calculs sont effectués en utilisant l'approximation GGA.



**Figure III. 3:** Densité totale et partielle des états du composé RbCrC.

Pour mieux comprendre la nature de la structure de la bande électronique, nous avons calculé les densités d'états totales (TDOS) et partielles (PDOS) pour les états de spin-up et de spin-down du RbCrC. Depuis le canal spin-up (TDOS) dans la figure III.3, un pic traverse le niveau de Fermi, révélant le comportement du conducteur. Cependant, dans le premier spin-down, un caractère semi-conducteur est observé, confirmant la demi-métallicité du matériau déjà observée dans la structure de bandes. Pour le spin majoritaire (spin-up), les états de PDOS situés dans la gamme :  $[-2.5, -0.6 \text{ eV}]$  sont principalement dus à une forte contribution des orbitales (3d) du Cr, avec une faible contribution de l'orbitale (2p) du C. Dans la gamme  $[0, 5 \text{ eV}]$ , les états sont essentiellement formés par l'orbitale C (2p). Pour le spin minoritaire (spin-down), dans l'intervalle  $[-2.5, -1 \text{ eV}]$ , les (TDOS) observés autour du niveau de Fermi viennent principalement d'une contribution importante de l'atome C. Au-dessus du niveau de Fermi,

dans les bandes de conduction, les états électroniques sont dus à une contribution majeure des états (3d) du Chrome.

### III.4 Propriétés magnétiques

Dans le but de déterminer les propriétés magnétiques du demi-Heusler RbCrC, nous avons calculé le moment magnétique total et partiels en utilisant l'approximation GGA. (Tableau III. 2).

**Tableau III.2.** Calcul du moment magnétique total ( $M_{tot}$  en  $\mu B$ ), moment magnétique interstitiel ( $M_{int}$  en  $\mu B$ ) et les moments magnétique atomiques de composé semi-heusler RbCrC.

Matériau	Méthode	$M_{Rb}$	$M_{Cr}$	$M_C$	$M_{inter}$	$M_{tot}$	$E_g$	Classification
RbCrC	GGA	-0.02	3.95	-0.95	0.02	3	1.84	DMF

La principale contribution au moment magnétique total ( $M_{tot}$ ) provient des atomes de Chrome (Cr) avec un moment magnétique partiel de  $3,95\mu B$ . La magnétisation provient principalement des électrons 3d Cr en raison de la grande division des échanges d'états t2g responsables du ferromagnétisme dans ce composé. De plus, le moment magnétique total  $M_{tot}$  de l'alliage RbCrC a une relation linéaire avec le nombre d'électrons de valence ( $Z_{tot}$ ) obéissant à la règle de Slater-Pauling [10].

$$M_{tot} = Z_{tot} - 8 \quad (III. 3)$$

Où RbCrC a 11 électrons de valence: Rb ( $1s^1$ ), Cr ( $4s^1 3d^5$ ) et C ( $2s^2, 2p^2$ ).

Selon l'équation (III. 3), le  $M_{tot}$  obtenu est égal à  $3\mu B$  pour RbCrC, ce qui est en bon accord avec les résultats calculés du **tableau III.2.**

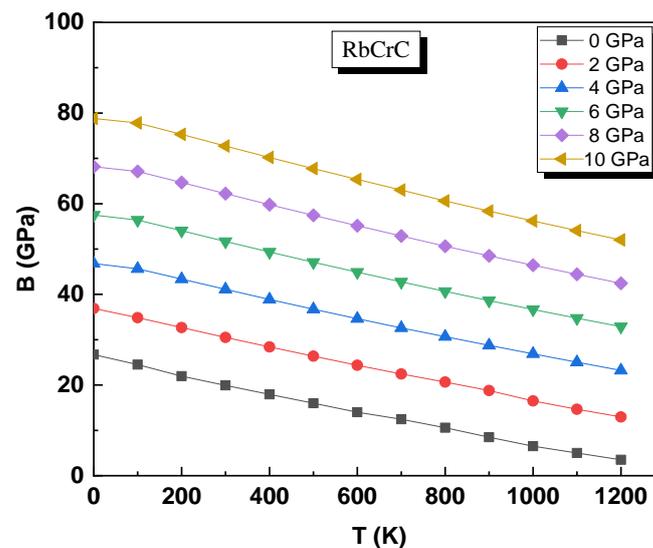
### III.5 Propriétés thermodynamiques

Au cours de cette partie, nous nous concentrons sur l'analyse des caractéristiques thermodynamiques afin d'approfondir nos connaissances sur les comportements particuliers du composé étudié lorsqu'il est exposé sous différentes pressions et températures via le modèle quasi-harmonique de Debye (MQHD) implémenté dans le programme Gibbs [11-12].

Les propriétés thermodynamiques sont obtenues dans l'intervalle de 0-1200 K et en variant la pression de 0-10 GPa.

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

La résistance du matériau à la compression est définie par le module de compressibilité, Dans la **figure III.4** du composé RbCrC, on peut observer comment le module de compressibilité évolue avec la température et la pression.



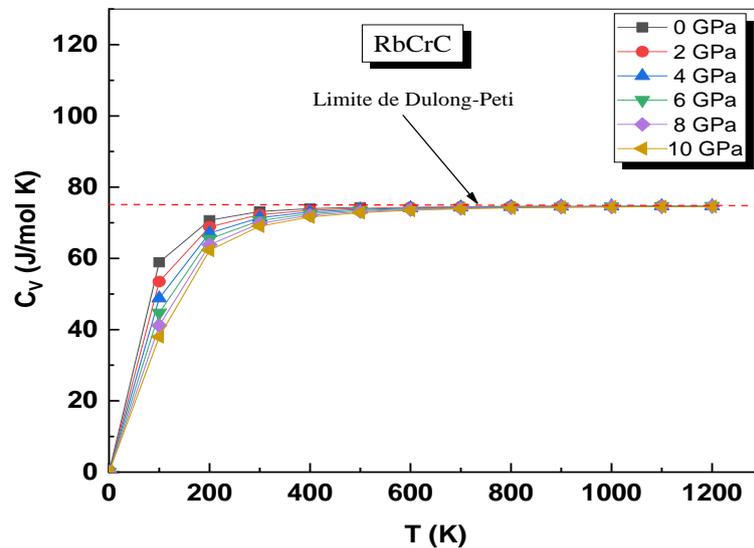
**Figure III. 4:** Variation du module de compressibilité B en fonction de la température de RbCrC.

Le module de compressibilité diminue progressivement. La même tendance est observée pour diverses valeurs de pression. Le module de compressibilité s'accroît presque linéairement avec la pression pour toute température donnée. Donc, la compressibilité décroît avec la croissance de la température à une pression donnée et augmente avec la pression à une température donnée. En conclusion, la dureté de ce matériau décroît avec l'augmentation de la température et elle s'accroît quand il est comprimé. Le calcul de module de compressibilité B aux conditions initiales (0K et 0 GPa), est de 27.07 GPa pour RbCrC, indiquant que cette valeur est en bon accord avec celle calculée à partir des propriétés structurales.

### III.5.2 Chaleur spécifique à volume constant ( $C_v$ )

L'évolution de la capacité thermique à volume constant  $C_v$  sous l'effet de la température pour différentes pressions est schématisée sur la figure III.5. On peut remarquer pour notre matériau que la  $C_v$  présente le même comportement sous pression et température.

$C_v$  augmente rapidement avec la température et suit la loi de Debye ( $C_v \propto T^3$ ) [13]. A partir de  $T = 600$  K, ( $C_v$ ) augmente lentement jusqu'à la valeur de  $75$  J / mol.K, atteignant la limite classique de Dulong-Petit, phénomène courant dans tous les solides [14].



**Figure III. 5:** Variation de la capacité thermique  $C_v$  en fonction de la température de RbCrC.

### III.5.3 Température de Debye ( $\theta_D$ )

La température de Debye  $\theta_D$  est le paramètre le plus important du (QHDM), qui est lié à la température de fusion, l'élasticité, la chaleur spécifique et les vibrations du réseau [14]. La variation de  $\theta_D$  en fonction de la température à différentes pressions est représentée sur la **figure III. 6**. À une pression donnée, à mesure que la température augmente, la température de Debye  $\theta_D$  diminue de manière presque linéaire. Cependant, à une température donnée,  $\theta_D$  augmente lorsque la pression augmente. De plus, on peut voir que le courbe de température de Debye présente des caractéristiques assez similaires à celles du module de compressibilité, car les deux sont des indicateurs de la dureté du matériau. En plus, à 0 GPa et 300K, la valeur obtenue de  $\theta_D$  (K) est 198.02 K pour notre matériau.

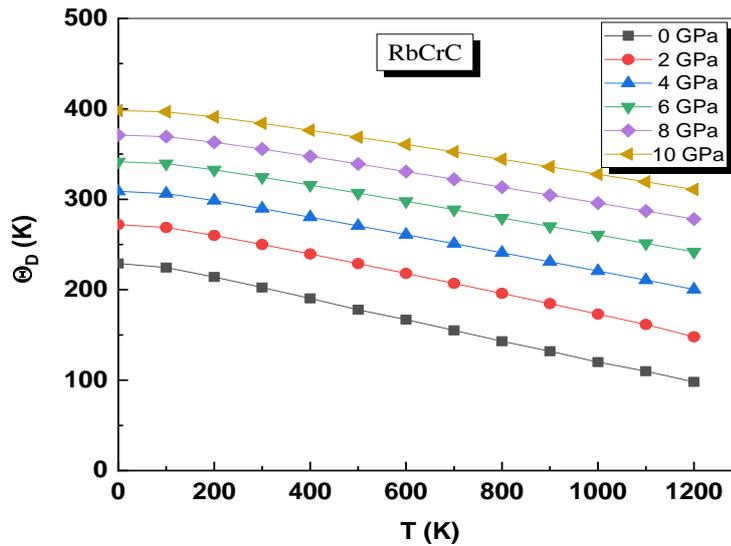


Figure III. 6: Variation de la température de Debye  $\theta_D$  en fonction de la température de RbCrC.

### III.5.4 Le Coefficient de dilatation thermique ( $\alpha$ )

Le coefficient de dilatation thermique d'un solide notée ( $\alpha$ ) est l'aptitude d'un matériau soumis à une variation de température à se dilater ou à se contracter (amplitude des vibrations atomiques de la structure). Les variations du coefficient de dilatation thermique en fonction de la température et la pression sont schématisées sur la figure III.7. Le coefficient de dilatation thermique augmente linéairement en fonction de la température, en particulier à 0 GPa. La valeur moyenne du coefficient ( $\alpha$ ) à 0 GPa et 300 K est d'environ  $24 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  pour RbCrC. Ceci est notamment dû au terme harmonique dans l'énergie cohésive pour les petits déplacements de l'atome autour de sa position d'équilibre pour ce matériau.

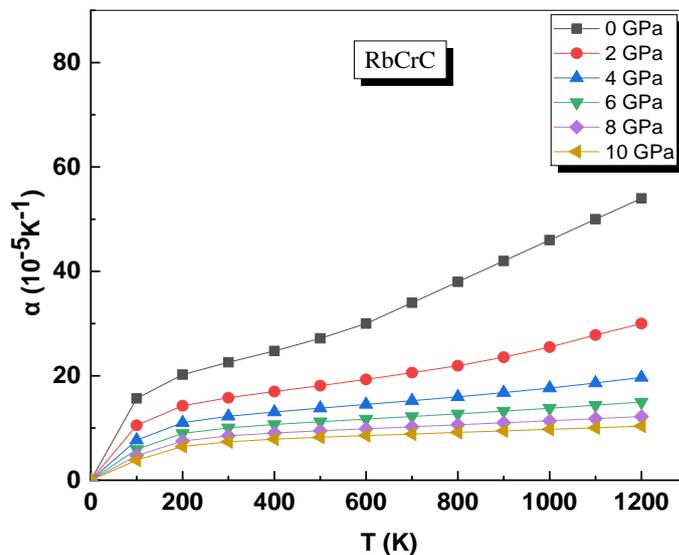


Figure III. 7 : Variation du coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  en fonction de la température

### **III.6. Conclusion**

Dans ce travail, nous avons examiné les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques du composé RbCrC. D'après les résultats calculés, notre matériau cristallise dans la configuration ferromagnétique en phase I. La structure électronique confirme la nature demi-métallique avec un gap indirecte. De plus, le moment magnétique total de 3  $\mu\text{B}$ , qui obéit à la règle de Slater-Pauling, est bien maintenu sur une large plage de valeurs de paramètres de réseau qui dépasse de 6 Å pour RbCrC. Le modèle quasi-harmonique de Debye (QHDM) est également utilisé pour confirmer la stabilité thermodynamique du composé étudié. Nos résultats confirment que la nouvelle classe d'alliage semi-Heusler est thermodynamiquement stable, par conséquent, on s'attend à ce matériau soit de bon candidat pour des applications technologiques très utiles.

## Références bibliographiques

- [1] H. Rozale, A. Amar, A. Lakdja, A. Moukadem, A. Chahed, J. Magn. Magn. Mater. 336 (2013) 83.
- [2] H. Rozale, M. Khetir, A. Amar, A. Lakdja, A. Sayede, O. Benhelal, Superlattice. Microst. 74 (2014) 146.
- [3] A. Abada, N. Marbouh, J Supercond Nov Magn. 33 (2020) 889.
- [4] F. Bendahma, M. Mana, M. Hammou, S. Terkhi, N. Benderdouche, and S. Bentata, Revista Mexicana de Física. 68 (2022) 1.
- [5] N. Karimian and F. Ahmadian, Solid States Comm. 223 (2015) 60.
- [6] S. Ohta, T. Kumada, T. Fukushima, S. Matsuyama and K. Sugiyama, *J. Magn. Magn Mater.* 139, 292 (1995).
- [7] X.P. Wei, Y. L. Zhang, Y. D. Chu, X. W. Sun, T. Sun, P. Guo and J. B. Deng, *J. of Physics and Chemistry of Solids.* 82, 28 (2015).
- [8] Ascric Rachid, étude des propriétés physique des chalcopyrites  $\text{CuInSe}_2$ ,  $\text{CuGaSe}_2$ ,  $\text{Cu(In, Ga)Se}_2$ , mémoire de magister, usto MB, 2011.
- [9] S.Naoui, les alliages d'heusler semi-métallique : étude théorique des propriétés magnétique et électronique, thèse doctorat, université de batna1, 29-11-2019.
- [10] J. Kübler, *Physica B.* 127, 257 (1984).
- [11] Blanco, M.A., Francisco, E., Luaña, V.: *GIBBS: Comput. Phys. Commun.* 158, 57 (2004).
- [12] Otero-de-la-Roza, A., Abbasi-Pérez, D., Luaña V.: *Comput. Phys. Commun.* 182, 2232 (2011).
- [13] P. Debye, Debye model, *Ann. Phys.* 39 (1912) 789.
- [14] O. Sahnoun, H. Bouhani-Benziane, M. Sahnoun, M. Driz, C. Daul, *Comput. Mater. Sci.* 77 (2013) 316.

## Conclusion générale

L'étude de recherche effectuée dans le cadre de cette mémoire portait sur une étude théorique des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques du matériau semi-Heusler RbCrC en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées avec potentiel complet (FP-LAPW) basée dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implantée dans le code de calcul WIEN2k. L'énergie d'échange et de corrélation est traitée par l'approximation du gradient généralisé (GGA). Cette méthode est efficace pour l'étude des solides.

Les résultats obtenus sont résumés comme-suit :

- ✓ Pour les propriétés structurales : Le calcul montre que notre composé est stable dans la phase ferromagnétique de type I où tous les paramètres structuraux à l'équilibre sont déterminés dans cette phase (le paramètre du réseau ( $a$ ), le module de compressibilité ( $B$ ) et sa première dérivée ( $B'$ ) par rapport à la pression).
  - Les valeurs du module de compressibilité ( $B$ ) obtenues en se basant sur les propriétés structurales et thermodynamiques sont semblables, ainsi les valeurs négatives de l'énergie de formation  $E_f$  et de cohésion montrent que ce matériau peut être facilement produit expérimentalement avec des processus de formation exothermiques.
- ✓ Pour les propriétés électroniques : la structure de bande présente un gap indirect au spin-down montre un caractère semi-conducteur et un caractère métallique au spin-up, et pour la densité d'état DOS on indique la contribution d'état de chaque orbitale ceci résulte que notre composé est un demi-métal.
- ✓ Pour les propriétés magnétiques, l'alliage RbCrC présente un moment magnétique total  $M_{tot}$  qui est linéaire au nombre de valence ( $Z_{tot}$ ), conformes à la règle de Slater – Pauling.
- ✓ Pour les propriétés thermodynamiques :
  - a) La température de Debye  $\theta_D$  calculé à une température donnée augmente lorsque la pression augmente, néanmoins à pression constante la température de Debye diminue de manière linéaire avec l'augmentation de la température.
  - b) La capacité thermique  $C_v$  augmente rapidement jusqu'à ce qu'elle atteigne la limite classique de Dulong Petit, après cela sa valeur se stabilise.
  - c) Le RbCrC possède un coefficient de dilatation thermique faible ( $24 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ ) à température ambiante indique que ce matériau ne se déformera pas facilement.

Enfin, les valeurs obtenues pour chaque caractéristique de notre composé  $RbCrC$  étaient conformes à nos attentes, offrant une variété de possibilités pour l'utilisation de ce composé, ainsi que la stabilité thermique du notre matériau est confirmée par les propriétés thermodynamiques étudiées à l'aide de l'approximation Quasi Harmonique de Debye. Donc, il est important de souligner que nos prédictions montrent que  $RbCrC$  peut être un candidat potentiel pour les futures applications dans le domaine de la spintronique, telles que la magnéto-électronique, les générateurs, les transformateurs et les mémoires magnétiques (disques durs, etc.), ainsi que dans le domaine technique.