



وزارة البحث العلمي والتعليم العالي
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE
LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
جامعة عبد الحميد بن باديس مستغانم
Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem
كلية العلوم و التكنولوجيا
Faculté des Sciences et de la Technologie
DEPARTEMENT DE GENIE DES PROCÉDES



N° d'ordre : M2...../IP/2022

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Génie des procédés
Option: Industries pétrochimiques

Thème

Etude de la stabilité thermodynamique et l'enthalpie de formation des matériaux N_2BaX ($X=Rb, Cs$) pour applications industrielles

Présenté par
ABDALLAH BENSELLOUA Amine.
BELAMINE Abderrahmen.

Soutenu le 23 /06 / 2022 devant le jury composé de :

CHERID Samira	MCA	Université de Mostaganem	Présidente
FARES Zineb	MAA	Université de Mostaganem	Examinatrice
BENATMANE Saadiya	MCA	Université de Mostaganem	Encadrante

Année Universitaire 2021/2022

Résumé : Le travail présenté dans ce mémoire portera sur une étude prédictive des propriétés structurales, électroniques, élastiques et magnétiques composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$). L'étude sera réalisée en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémenté dans le code Wien2K. L'énergie d'échange et de corrélation est décrite par l'approximation du gradient généralisé (GGA) de Perdew, Burk et Ernzerhof. La structure cristalline des composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$) ainsi que sa structure de bande et sa densité d'état électronique, seront investigués. Les principaux paramètres élastiques seront déterminés.

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

Abstract: The work presented in this memory will focus on a predictive study of the structural, electronic, elastic and magnetic properties of the full-Heusler N_2BaX ($X=Rb, Cs$). The study will be carried out using the augmented linear wave method with total potential (FP-LAPW) based on the density functional theory (DFT), implemented in the Wien2K code. The energy of exchange and correlation is described by the generalized gradient approximation (GGA) of Perdew, Burk and Ernzerhof. The crystal structure of the N_2BaX ($X=Rb, Cs$) compounds as well as its band structure and its electron state density will be investigated. The main elastic parameters will be determined.

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

ملخص : تعاطم في الآونة الحالية الاهتمام بالمغناطيس في بعض المواد هـ س ل ر والتي لها تطبيقات هامة في مجال أجهزة الالكترونيات الدوارنية . بواسطة طريقة الأمواج المستوية خطيا FP-LAPW والتي تركز على نظرية الكثافة الدالية DFT مدمجة ضمن برنامج WIEN2K قمنا بحساب الخصائص البنيوية , الالكترونية , المغناطيسية, المطاطية للمركب (N_2BaX ($X=Rb, Cs$)) عن طريق هذه النظرية, قمنا باستعمال تقريب التدرج المعمم PBE-GGA لأجل حساب كمون التبادل – الارتباط (XC) بغية حساب الخصائص البنيوية والإلكترونية المراد معرفتها: وسط الشبكة ،معامل الانضغاط وعصابات الطاقة .وانتهينا بمقارنة التنبؤات الأولية بالنتائج المحققة بالأعمال النظرية المتعلقة بها .وقد وجد أن العزم المغناطيسي في هذ المركب يساوي عدد كامل .

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

Dédicaces

Je dédie ce travail, tout d'abord :

A mes parents qui m'ont soutenu et pousser à aller plus loin et surmonter tous les obstacles.

A mes sœurs et mes frères.

A mes grands parents, paix à leurs âmes.

Et une dédicace spéciale à mon père disparu trop tôt, qui nous manque énormément et qui serait très fier de moi.

Abdallah Benselloua Amine.

Dédicaces

Je dédie ce travail

A mes chers parents.

A mes sœurs et mes frères.

A mes amis.

A tous mes proches.

Belamine Abderrahmen.

Remerciements

En premier lieu, je tiens tout d'abord à remercier **DIEU** le tout puissant et miséricordieux, qui m'a donné la force et la patience d'achever ce modeste travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes remerciements les plus chaleureux et les plus sincères à mon encadreur **M^{me} BENATMANE Saadiya**. Merci à vous, pour le suivi de ce travail, pour l'encadrement et pour les corrections apportées à ce manuscrit.

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

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

Merci également à ma famille qui m'a soutenu pendant toutes ces années, sans oublier mes amis, mes collègues et tous les enseignants du département GP de l'université de Mostaganem.

Liste des figures

Figure I.1	Tableau périodique des éléments. Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert. Un grand nombre d'alliages Heusler est possible d'être formé par la combinaison des différents éléments indiqués au tableau [3].	5
Figure I.2	Une représentation schématique du sel de roche, de la structure du type Zinc-blend et Semi-Heusler [10].	7
Figure I.3	Représentation de diverses structures d'alliages Heusler complets [14].	8
Figure I.4	Illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles de composés Heusler quaternaires (a) type 1, (b) type 2 et (c) type 3 [18].	9
Figure III.1	Différents types de structure pour le composé N_2BaX ($X=Rb, Cs$)	22
Figure III.2	Optimisation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'approximation GGA-PBE.	23
Figure III.3	Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du N_2BaCs (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.	29
Figure III.4	Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du N_2BaRb (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.	30
Figure III.5	Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du N_2BaCs La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.	31
Figure III.6	Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du N_2BaRb La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.	32

Liste des tableaux

Tableau III.1	Valeurs des RMT en u.a pour les différents atomes N, Ba, Rb et Cs	21
Tableau III.2	Etat de valence pour chaque atome des composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$)	21
Tableau III.3	Valeurs des calculs ferromagnétique, non ferromagnétique et anti ferromagnétique en utilisant GGA-PBE du paramètre de réseau d'équilibre a (Å), module de compressibilité B (GPa), sa dérivée (B'), et la différence d'énergie entre les états	24
Tableau III.4	les constantes et les paramètres élastique	28
Tableau III.5	Valeurs du gap E_g (eV) en utilisant l'approximation GGA-PBE et mBJ-GGG-PBE	30
Tableau III.6	Valeurs des moments magnétiques, μ_{Total} (μ_B /molécule), par atome μ_{Ba} , μ_N , μ_{Rb} et μ_{Cs} (μ_B)	34

Liste des abréviations

DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité (Density functional theory)	10
GGA	Approximation du gradient généralisée (Generalized gradient approximation)	16
LDA	Approximation de densité Locale (Local Density Approximation)	16
FP-LAPW	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total	16
SCF	Self Consistent Field	18
NM	Non-magnétique (Non-magnetic)	24
FM	Ferromagnétique (Ferromagnetic)	24
AFM	Antiféromagnétique (Antiferromagnetic)	24
B	Module de compressibilité (Bulk modulus)	24
A	Paramètre de maille (Lattice parameter)	24
E_c	Energie de cohésion (The cohesive energy)	24
E_f	Energie de formation (The formation energy)	24
DOS	Densité d'états (Density of States)	28
E_g	Band gap	30
E_f	Niveau de Fermi (Fermi level)	30

Table des matières

Introduction Générale	1
REFERENCES.....	3
Chapitre I. Les alliages d'Heusler	4
I.1 Introduction.....	4
I.2 Définition d'un alliage.....	4
I.3 Généralité sur les alliages Heusler.....	5
I.3.1 Alliage semi Heusler XYZ (Half-Heusler)	6
I.3.2 Alliages Heusler complets X_2YZ (Full-Heusler)	7
I.3.3 Composés Heusler Quaternaires.....	8
I.4 Les applications.....	9
I.4.1 magnétorésistance Géante (GMR)	9
I.4.2 Magnétorésistance Tunnel (TMR)	9
I.5 Conclusion.....	10
REFERENCES.....	11
Chapitre II. Formalise et méthodes de calculs	12
II.1 Introduction.....	12
II.2 Les approximations proposées pour résoudre l'équation de Schrödinger	13
II.2.1 L'approximation de Born Oppenheimer.....	13
II.2.2 Approximation de Hartree	13
II.2.3 Approximation de Hartree-Fock.....	13
II.3 Fondement de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).....	14
II.3.1 Principe	14
II.3.2 La densité électronique	14
II.3.3 Premier théorème de Hohenberg et kohn.....	14
II.3.4 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn	16
II.3.5 L'approximation de densité Locale (LDA)	16
II.3.6 L'approximation du gradient généralisé (GGA)	16
II.4 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	16

II.5 Le code Wien2k.....	17
II.6 Conclusion.....	18
REFERENCES.....	19
Chapitre III. Résultats et discussions.....	20
III.1 Introduction.....	20
III.2 Détails de calculs.....	20
III.3 Propriétés structurales	21
III.4 Propriétés élastiques.....	25
III.5 Propriétés électroniques.....	28
III.5.a Structure de bande.....	28
III.5.b Densité d'états.....	31
III.6 Les propriétés magnétiques.....	33
III.7 Conclusion	34
REFERENCES.....	35
CONCLUSION GENERALE.....	36

Introduction Générale

Parmi les technologies les plus importantes sur lesquelles les scientifiques travaillent et qui connaissent constamment un grand développement, les appareils électroniques et les appareils magnétique, en raison de la connaissance approfondie des propriétés physiques d'une substance les propriétés physiques d'un solide sont étroitement liées au comportement les électrons qui le composent. En plus de l'attention portée aux propriétés structurales, mécaniques (élasticité, métallurgie physique), électroniques (diélectriques, semiconducteurs, conducteurs), magnétiques et même thermodynamiques. Le plus important est 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 [1-3].

De nos jours, les matériaux magnétiques sont devenus omniprésents dans notre environnement vu leur grand usage dans la technologie moderne. Ils composent de nombreux dispositifs électromécaniques et électroniques, notamment les génératrices, les transformateurs, les moteurs électriques, les postes de radio ou de télévision, les téléphones, les ordinateurs et les appareils audio ou vidéo [4].

Les matériaux magnétiques sont également des constituants indispensables dans une large gamme d'équipements industriels et médicaux.

Ces matériaux sont caractérisés par leurs propriétés dites intrinsèques (dépendent de la composition chimique) et extrinsèques (fonction de la microstructure) [5].

Le but de notre travail est d'étudier certains matériaux de type heusler sans la présence d'atomes de métaux de transition ou de terre rare, cette classe comprend des matériaux contenant uniquement des atomes avec des orbitales s ou p partiellement remplies. Au cours des dernières années, de nombreux travaux ont été réalisés sur de nombreux matériaux sp ,

L'outil informatique de base qui sert de guide au génie des matériaux est actuellement la modélisation et la simulation numérique, il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théoriques qui peuvent expliquer les observations expérimentales, et surtout d'effectuer des simulations ou « des expériences virtuelles » qui peuvent prédire le comportement des matériaux là où l'expérience réelle fait défaut, ou quelles soit très coûteuse et difficilement réalisable. Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se ressentent, et d'orienter l'industrie ou le génie des matériaux vers les meilleurs choix avec un coût minimum aussi nombreuses qu'elles soient les méthodes de modélisation et de simulation commencent toutes du même principe, à savoir que la connaissance des propriétés d'un matériau donné est étroitement liée à la détermination de son énergie totale.

Les calculs *ab-initio* constituent un outil essentiel dans la physique de la matière condensée moderne et la chimie quantique moléculaire. Ils permettent les calculs des propriétés des systèmes à électrons corrélés. Le mouvement corrélé des électrons joue un rôle crucial dans l'agrégation des atomes dans les molécules et les solides, les propriétés de transport électronique et de nombreux autres phénomènes physiques majeurs.

Dans ce travail, nous nous sommes proposés d'étudier les propriétés structurales, élastiques, magnétiques et électroniques de quelques heusler N_2BaX ($X=Cs, Rb$) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité, en utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE).

Ce mémoire est structuré comme suit : une introduction générale qui sera suivie par le premier chapitre qui illustre quelques généralités de la classe du matériau étudié. Le deuxième chapitre est consacré à la méthodologie de calcul qui est basée sur la méthode FP-LAPW implémenté dans le code WIEN2K ou l'énergie d'échange et corrélation est traitée par l'approximation du gradient généralisé GGA. Le troisième et dernier chapitre expose les résultats obtenus ainsi que leurs interprétations. Ce mémoire est clôturé par la conclusion générale et quelques perspectives.

RÉFÉRENCE

- [1] Youn SJ, Min BI, Phys Rev B 51 (1995) 10436.
- [2] S.Ishida, S.Akazawa, Y.Kubo and J.Ishida, J. Phys. F: Met. Phys, 12, (1982) 1111-1122.
- [3] S.Fujii, S.Ishida and S.Asano, J. Phys. Soc. Jpn, 64, 185-191 (1995).
- [4] V.A. Chernenko, V. A. L'vov, R. Mullner, G. Kosterz and T. Takagi, Phys. Rev. B 69, (2004) 134410.
- [5] S. E. Kulkova, S. V. Eremeev, T. Kakeshita, S. S. Kulkov and G. E. Rudenski, Mater. Trans. 47, (2006) 599.

Chapitre I

Les alliages d'Heusler

I.1 Introduction

Depuis les premières observations des faits magnétiques par les forces attractives entre la magnétite et le fer, ces phénomènes ont constamment attiré l'attention de l'homme en générale et en particulier les scientifiques surtout après les grandes avancées dans la théorie du magnétisme durant le XIX^e siècle, notamment après la découverte des phénomènes de para-, dia- et ferromagnétisme par Curie et la détermination du moment magnétique intrinsèque de l'électron par Dirac. Les recherches dans ce domaines ne cessent pas à développer jusqu'à ce jour où on trouve les matériaux magnétiques partout dans notre vie quotidienne, ils sont présentés presque dans toutes les machines, en partant de l'appareil le plus simple qui est la boussole vers les dispositifs les plus complexes comme les ordinateurs. Dans ce chapitre on va donner quelques notions de base concernant le magnétisme et on va décrire les différents comportements des matériaux en présence d'un champ magnétique extérieur, puis on va définir les alliages d'Heuslers, leurs types et leurs propriétés, et on finit cette partie par les applications de ces matériaux en domaine de la spintronique.

I.2 Définition d'un alliage

Le terme alliage désigne un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux, ce terme était réservé durant une bonne période aux métaux, cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, plus particulièrement la céramique est les polymères.

En effet, le progrès fait par les chimistes, les physiciens et technologistes à contribuer efficacement à l'étude et l'élaboration de nouveaux matériaux parmi eux les alliages semi-conducteurs.

I.3 Généralité sur les alliages heusler

Depuis la découverte de la demi-métallicité ferromagnétique des alliages Heusler, ces derniers sont devenus un domaine d'intérêt de la recherche pour les applications de l'électronique de spin [1]. Le terme alliages 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 Cu_2MnAl [2]. 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. Les principales combinaisons des alliages Heusler sont présentées sur la figure I.1.

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. Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert. Un grand nombre d'alliages Heusler est possible d'être formé par la combinaison des différents éléments indiqués au tableau [3].

Étonnamment, les propriétés de nombreux composés Heusler peuvent être prédites en comptant simplement le nombre d'électrons de valence [4]. Les alliages Heusler ferromagnétiques semi-métalliques sont des semi-conducteurs selon une orientation du spin, alors qu'ils sont métalliques

pour l'orientation opposée du spin. Ces composés montrent une complète polarisation de spin pour les électrons de conduction, ce qui les rend matériaux plus adaptés pour les applications technologiques en spintronique. Les alliages Heusler ont continuellement attiré l'intérêt en raison de leurs températures de Curie élevées [5]. Actuellement, ils sont utilisés dans les jonctions tunnel magnétiques [6].

I.3.1 Alliage semi heusler XYZ (half-heusler)

La famille des alliages semi-Heusler a été largement étudiée ces dernières années et sont connus pour la richesse de leurs propriétés physiques, qui comprennent : le ferromagnétisme demi-métallique, les propriétés de la mémoire de forme, les propriétés semi-conductrices et thermoélectriques. Les alliages demi-heusler XYZ sont intermétalliques ternaires impliquant deux TM différents X et Y, et Z est un élément à sp valence et cristallisé dans la structure cubique du type MgAgAs cubique ou du type C1b (groupe de l'espace $F4 / 3m$ (216)). Cette structure se compose de trois sous-réseaux fcc interpénétrant et remplis. La troisième structure fcc est décalée d'un quart de la cellule unitaire de la diagonale du corps de la structure du sel de roche (NaCl) [7]. En principe, les alliages demi-Heusler forment une variante farcie et farcie de semi-conducteurs classiques à coquilles fermées d'électrons qui cristallisent dans un réseau de Zinc blende (type ZnS) tel que GaAs. Les huit électrons de valence sont répartis entre trois atomes au lieu de deux. Le troisième atome occupe les espaces vacants octaédriques dans le réseau de type ZnS. Ce fait conduit automatiquement à la formation d'un sous-réseau de type rocheux caractérisé par une interaction de liaison ionique [8]. La relation entre ces différents réseaux cristallins est affichée dans la (figure I.3) La relation entre ces trois structures peut être comprise de la manière suivante : dans la structure stable conventionnelle, les atomes Y et Z sont situés aux positions 4a (0, 0, 0) et 4b ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$), formant le rock- arrangement de structure de sel. L'atome X est situé dans la poche coordonnée octaédrique, à l'une des positions centrales du cube 4c ($\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}$) laissant l'autre position 4d ($\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}$) vide. Lorsque les positions atomiques Z sont vides, la structure est analogue à la structure zinc-blende, ce qui est courant pour un grand nombre de semi-conducteurs [9].

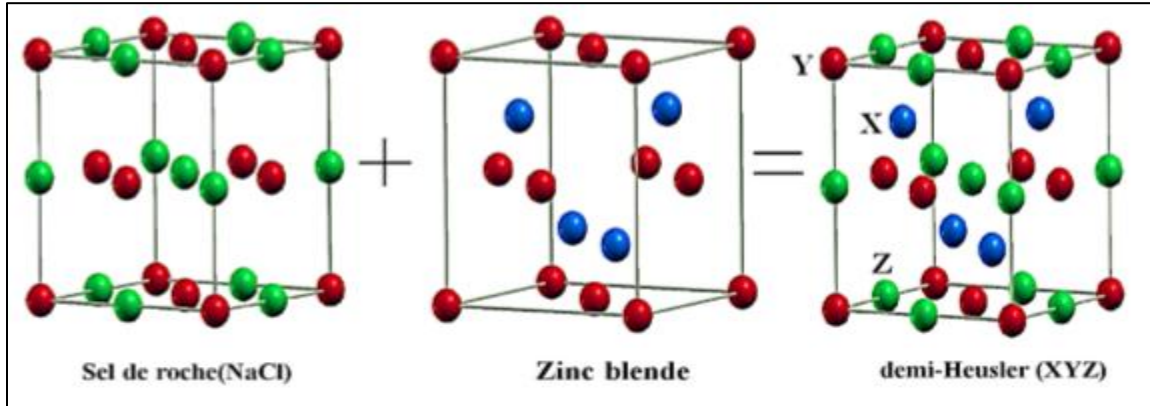


Figure I.2: Une représentation schématique du sel de roche, de la structure du type Zinc-blend et Semi-Heusler [10].

I.3.2 Alliage heusler complets X_2YZ (full-heusler)

Les alliages Heusler complets sont des composés intermétalliques ternaires qui peuvent être définis par la formule stœchiométrique X_2YZ , où X et Y sont des éléments de transition et Z est un élément de groupe III, IV ou V. Cu_2MnSn a été le premier alliage Heusler découvert par Heusler [11]. Par la suite, un grand nombre d'alliages Heusler ont été découverts avec une large gamme de propriétés physiques.

Les alliages Heusler complets X_2YZ sont généralement cristallisés en deux structures cubiques :

- Structure cubique régulière de Heusler (Type- Cu_2MnAl) avec groupe spatial $Fm\bar{3}m$ (N 225), [12]. Si le nombre atomique de X est supérieur à Y ($Z(X) > Z(Y)$), les deux atomes de X sont des sites tétraédriques, c'est-à-dire les emplacements (0,0,0) et (1/2,1/2,1/2), tandis que les atomes Y et Z se trouvent sur les sites octaédriques et les positions (1/4, 1/4, 1/4) pour les atomes Y et (3/4, 3/4, 3/4) pour les atomes Z (Figure I.3(a)).
- La structure cubique inverse de Heusler (Type- Hg_2CuTi) avec le groupe spatial $F\bar{4}3m$ (N 216) [13]. Si $Z(Y) > Z(X)$ Les atomes X sont placés sur les positions 4a (0,0,0) et 3d (3/4, 3/4, 3/4) alors que les atomes Y et Z sont situés à 4b (1/2,1/2,1/2) et 4c (1/4,1/4,1/4), respectivement. (Figure I.3(b))

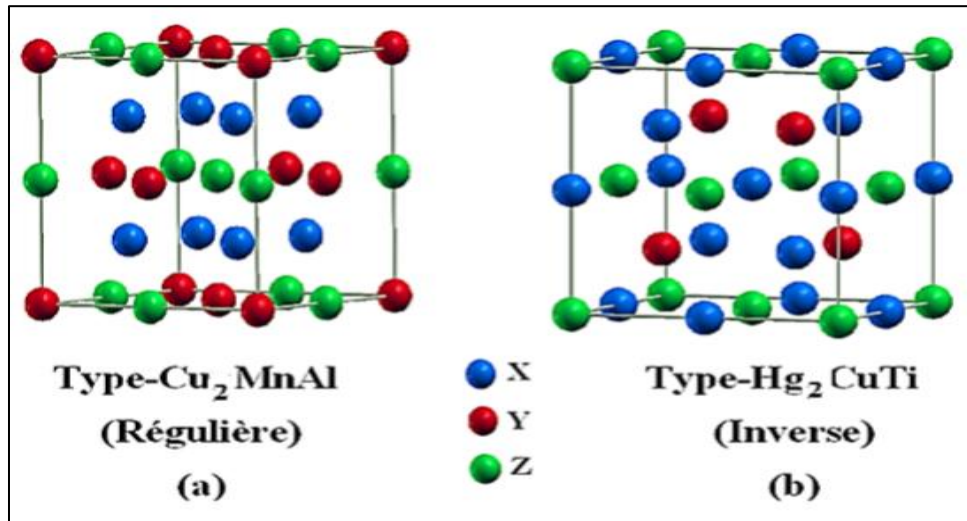


Figure I.3: Représentation de diverses structures d'alliages Heusler complets [14].

I.3.3 Composés 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 [15]. Lorsque l'un des deux atomes X dans les composés X₂YZ (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.4).

Pour les composés de Heusler quaternaires de type LiMgPbSb, il existe trois arrangements d'atomes différents possibles [16]. La responsabilité de cette profession portant sur les alliages quaternaires de Heusler a été prouvée par des études théoriques et expérimentales [17].

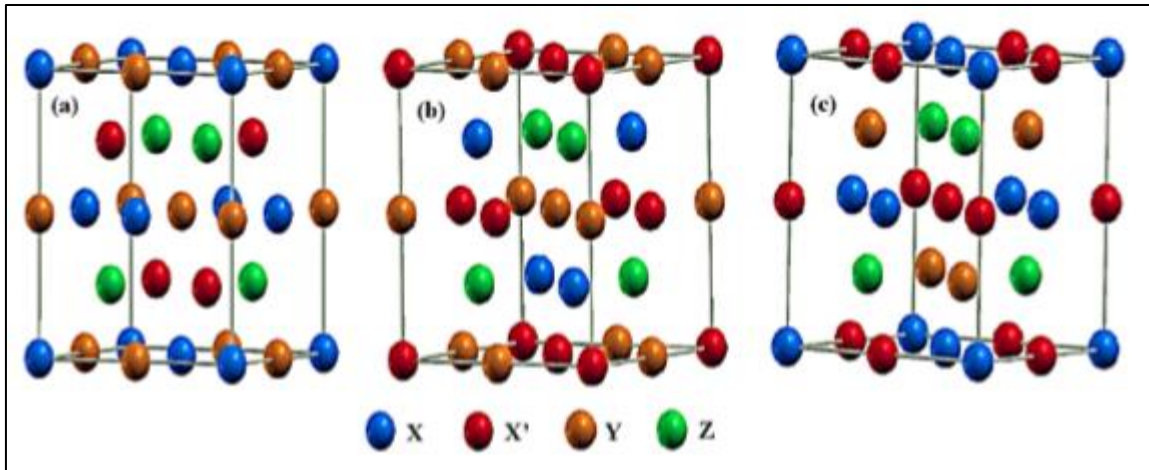


Figure I.4 : Illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles de composés Heusler quaternaires (a) type 1, (b) type 2 et (c) type 3 [18].

I.4 Les applications

Ces dernières années, la Spintronique, ou électronique de spin, est devenue incontournable dans le domaine du stockage de l'information.

La spintronique est une nouvelle technologie qui met à profit le spin de l'électron et plus précisément, le phénomène de courant polarisé en spin.

I.4.1 magnétorésistance Géante (GMR)

La GMR elle est observée dans un empilement de type Ferro Métal Ferro. Elle se manifeste comme une différence de résistance électrique entre une configuration où les aimantations des couches ferromagnétiques sont parallèles, est une configuration où les aimantations sont antiparallèles, la GMR est un effet quantique observé dans les structures de films minces composées d'une alternance de couches ferromagnétiques et de couches non magnétiques communément appelées multicouches [19-22].

I.4.2 Magnétorésistance Tunnel (TMR)

La TMR peut être observé dans les systèmes Ferro Isolant Ferro. Elle se manifeste comme une variation de résistance électrique, d'un courant traversant l'isolant par effet tunnel, en fonction de la configuration de matériaux ferromagnétiques. La conduction purement quantique entre les deux matériaux ferromagnétiques implique que la TMR est liée à la différence d'états disponibles pour les spins up et les spins down, de part et d'autre et d'autre de la barrière [23].

I.5 Conclusion

Dans ce chapitre, on a donné un aperçu général sur les alliages Heusler et plus précisément les alliages Full-Heusler qui sont caractérisés par leurs grandes températures de Curie et un grand moment magnétique intrinsèque, et dont les propriétés physico-chimiques de ces alliages Full-Heusler sont traitées par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui sera éclaircie dans le chapitre suivant.

RÉFÉRENCES

- [1] R. A. de Groot and F. M. Mueller, "New Class of Materials : Half-Metallic Ferromagnets," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, no. 25, pp. (1983) 2024–2027.
- [2] F. Heusler, "Über magnetische Manganlegierungen," *Verhandlungen Dtsch. Phys. Ges.*, vol. 5, p. 219, 1903.
- [3] H.U. Schuster, H.W. Hinterkeuser, W. Schäfer, G. Will, *Z Naturforsch B* 31 (1976)1540.
- [4] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, *Angew Chem Int Ed* 46 (2007) 668.
- [5] S. Wurmehl, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H.J. Lin, *Appl Phys Lett* 88 (2006) 032503.
- [6] W. Wang, E. Lui, M. Kodzuka, H. Sukegawa, M. Wojcik, E. Jedryka, *Phys Rev B* 81 (2010) 140402.
- [7] T. Graf, C. Felser, S. S. P. Parkin, *Progress in Solid State Chemistry* 39 (2011) 1-50
- [8] F. Casper, T. Graf, S. Chadov, B. Balke, C. Felser ; *Semicond. Sci. Technol.* 27 (2012)063001
- [9] B. R. K. Nanda and I. Dasgupta, *J. Phys : Condens. Matter* 17 (2005)5037-5048
- [10] F. Heusler, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* 5 (1903) 219.
- [11] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow. *Phys. Rev. Lett.*, 50(1983)2024.
- [12] M. Pusej and Z. Ban. *Croat. Chem. Acta*, 41(1969)79.
- [13] Peng-Li Yan, Jian-Min Zhang, Bo Zhou, Ke-Wei Xu, *J. Phys. D : Appl. Phys.* 49 (2016) 255002.
- [14] J. Ma, L. Feng, R. Guo, Y. Liao, R. Khenata, G. Liu and L. Wang, *Materials* 2017, 10(12), 1367
- [15] Y.C. Gao, X. Gao, *AIP Advances* 5, (2015)057157.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] M. Miao and W. R. Lambrecht, "Stability and half-metallicity of transition metal pnictides in tetrahedrally bonded structures," *Physical Review B*, vol. 71, p. 064407, 2005.
- [19] M. Julliere. *Physics Letters A*, 54 :225 –226, 1975.
- [20] M. Johnson and R. H. Silsbee. *Phys. Rev. Lett.*, 55 :1790–1793, Oct1985.
- [21] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2472–2475, Nov 1988.
- [22] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. *Phys. Rev. B*, 39 :4828–4830, Mar 1989.
- [23] W. Wang, E. Lui, M. Kodzuka, H. Sukegawa, M. Wojcik, E. Jedryka, *Phys Rev B* 81 (2010) 140402.

Chapitre II

Formalise et méthodes de calculs

II.1 Introduction

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

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

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

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

Où:

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

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

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

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

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

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

Où :

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

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

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

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

II.2.1 L'approximation de Born Oppenheimer

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

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

Soit

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

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

II.2.2 Approximation de Hartree

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

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

II.2.3 Approximation de Hartree-Fock

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

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

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

II.3 Fondement de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

II.3.1 Principe

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

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

II.3.2 La densité électronique

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

II.3.3 Premier théorème de Hohenberg et kohn

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

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

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

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

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

Et

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

Les termes indépendants du système sont alors regroupés au sein d'une fonctionnelle dite de Hohenberg-Kohn (F_{HK}). Cette nouvelle fonctionnelle contient $T_{el-el}[\rho]$, l'énergie cinétique électronique et $V_{el-el}[\rho]$, l'énergie potentielle due à l'interaction entre électrons. Les expressions explicites de ces deux fonctionnelles ne sont pas connues, par contre nous pouvons extraire de V_{el-el} la partie classique, énergie de Hartree ($V_{el-el}^{cal}[\rho]$).

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

II.3.4 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn

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

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

II.3.5 L'approximation de densité Locale (LDA)

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

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

Où :

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

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

II.3.6 L'approximation du gradient généralisé (GGA)

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

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

Où :

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

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

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

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

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

II.5 Le code Wien2k

La méthode FP-LAPW a été implémentée dans le code WIEN, un ensemble de programmes élaborés par Blaha, Schwarz, et leurs collaborateurs. Ce code a permis de traiter avec succès les systèmes supraconducteurs à haute température, les minéraux, les surfaces des métaux de transition, les oxydes non ferromagnétiques, les molécules ainsi que le gradient du champ électrique.

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

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

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

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

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

KGEM: Il génère le nombre de points spéciaux (points K) dans la zone de Brillouin.

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

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

LAPW0: Il génère le potentiel de poisson pour le calcul de la densité.

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

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

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

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

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

II.6 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre la méthodologie qui nous servira tout au long de ce travail. Il s'agit d'une méthode de calcul de structure électronique axée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité. En ce qui me concerne, la mise en œuvre est faite à l'aide du code de calcul wien2k. La DFT nécessite un certain nombre d'approximations pour la rendre pratique dans les simulations atomistiques. Certaines sont peu contrôlables durant les calculs comme le maillage de la première zone de Brillouin ou la taille de la base d'onde.

REFERENCES

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

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction

Comme nous l'avons déjà mentionnée, les alliages d'Heusler jouent un rôle important dans la physique de la spintronique parce qu'ils peuvent être magnétiques et présenter une structure électronique très différente selon le spin. Depuis la découverte de la demi-métallicité ferromagnétique, les alliages d'Heusler ont été grandement étudiés.

L'objectif du travail est l'étude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques des composés Heusler N_2BaX ($X=Rb, Cs$), En effet à notre connaissance il y'a relativement moins d'investigation encore pour les composés d'Heusler à base d'atome de terre rare (4f) dans la structure Heusler inverse avec Hg_2CuTi comme prototype.

III.2 Détails de calculs

Les résultats des calculs donnés dans cette partie sont obtenus par le code WIEN2k [1] basé sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) [2, 3]. Ce code est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) [4]. L'énergie d'échange et de corrélation est décrite par l'approximation du gradient généralisé (GGA) de Perdew, Burk et Ernzerhof [5].

Les fonctions de base, les densités électroniques, ainsi que les potentiels sont développés en combinaisons d'harmoniques sphériques autour des sites atomiques, c'est à dire dans les sphères atomiques, et en série de Fourier dans les régions interstitielles. Le paramètre $RMT \cdot K_{max}$ est choisi égale à 8, où RMT est le plus petit rayon muffin-tin de la sphère MT et K_{max} le module maximal de vecteur réciproque dans la première zone de Brillouin. Tableau III.1 montre les rayons des sphères RMT des différents atomes pris en considération durant les calculs par le code WIEN2k. L'intégration de la zone de Brillouin est réalisée avec 3000 k-points. N_2BaX ($X=Rb, Cs$)

Tableau III.1 Valeurs des RMT en u.a pour les différents atomes N, Ba, Rb et Cs

atome	N	Ba	Rb	Cs
RMT	2.00	2.52	1.91	2.15

Le choix des rayons des sphères muffin-tin valeurs doit répondre aux critères suivants :

- Éviter le chevauchement des sphères muffin-tin,
- Éviter la fuite de la charge des électrons de cœur de la sphère,
- Etre plus larges possibles pour économiser le temps de calcul,
- Les RMT des éléments s et p doivent être plus petits que ceux des éléments d.
- Le volume des sphères les plus larges ne doit pas dépasser 50% de celui des sphères les plus petites. Tableau III.2 donne l'état de valence de chaque atome des composés N_2BaX (X=Rb, Cs)

Tableau III.2 Etat de valence pour chaque atome des composés N_2BaX (X=Rb, Cs)

atome	N	Cs	Ba	Rb
Etat de valence	$1s^2 2s^2 2p^3$	$[Xe] 6s^1$	$[Xe] 6s^2$	$[Kr] 5s^1$

III.3 Propriétés structurales

Les alliages dits Full Heusler cristallisent, généralement, dans la structure régulière L21 ($Fm\bar{3}m$, groupe spatial N^0225) avec Cu_2MnAl ou comme prototype. Ils ont une composition stœchiométrique de type X_2YZ , où X et Y sont des métaux de transition et Z représente les éléments non magnétiques du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. En général, les alliages Heusler cristallisent dans des structures cubiques du réseau de Bravais cubique à faces centrées, dans lequel les atomes X occupent les sites 8c ($1/4, 1/4, 1/4$) et, l'atome Y, Z occupe les positions 4a ($1/2, 1/2, 1/2$) et 4b (0, 0,0) comme le montre la figure III.1 et la structure inverse ont groupe d'espace cubique $F4\bar{3}m$ (N^0216) avec Hg_2MnAl comme prototype dans tous les cas, l'élément X est plus électropositif que Y. Par conséquent, X et Z forment une structure rock salt pour réaliser une coordination octaédrique pour X, et les atomes Y restent occupent les sites tétraédrique à symétrie d'ordre 4, la structure est encore

décrite par quatre sous-réseaux CFC qui s'interpénètrent, mais les atomes X ne forment pas un réseau cubique simple. Au lieu de cela, ils sont placés sur les positions 4a(1/4,1/4,1/4) et 4d(3/4,3/4,3/4) tandis que les atomes Y et Z sont situés à 4b(1/4,1/4,1/4) et 4c(0,0,0), respectivement cette structure Heusler inverse.

Nous avons effectué l'optimisation des propriétés structurales dans la structure régulière L21 avec Cu_2MnAl .

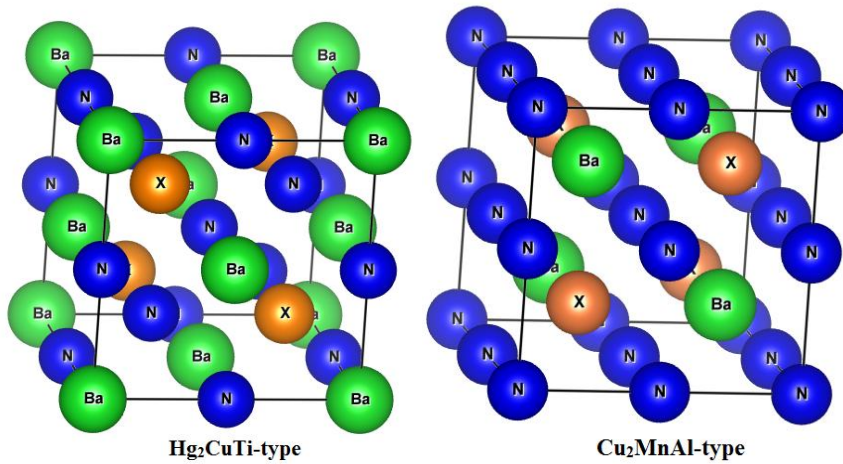


Figure III.1 Différents types de structure pour le composé N_2BaX ($\text{X}=\text{Rb}, \text{Cs}$)

Afin d'obtenir la structure de l'état fondamental de notre alliage et l'état magnétique favorable, nous avons effectué des calculs d'énergie totale en fonction du volume pour les trois différents types de structures possibles pour les phases non magnétique (NM), ferromagnétique (FM) et antiferromagnétique (AFM). La structure des Heusler N_2BaX ($\text{X}=\text{Rb}, \text{Cs}$) a été optimisée en calculant l'énergie totale en fonction du volume, puis en ajustant les données à l'équation d'état de Birch-Murnaghan [6] :

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

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

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

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

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.3})$$

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

$$E(V) = E_0 + \left[\frac{B}{B'(B'-1)} \right] \times \left[V \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - V_0 \right] + \frac{B}{B'} (V - V_0) \quad (\text{III.4})$$

La courbe $E(V)$ est représentée dans la figure III.2.

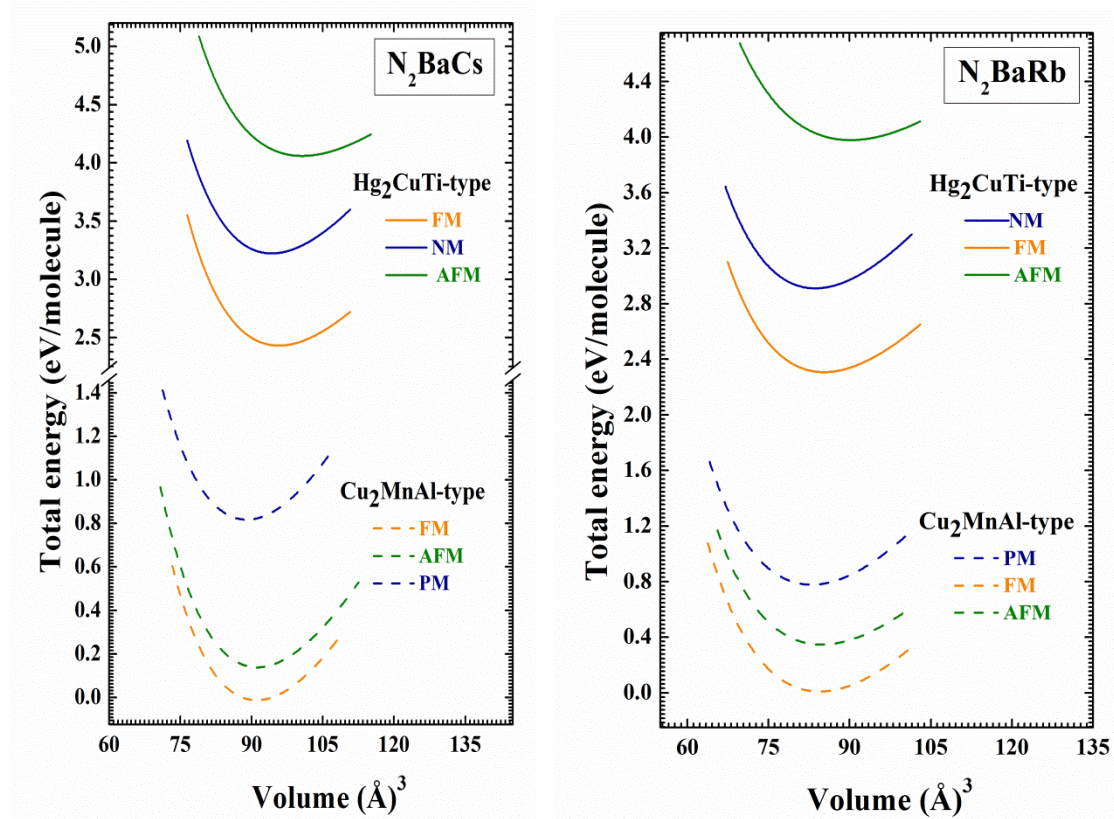


Figure III.2 Optimisation de l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'approximation GGA-PBE.

D'après la figure III.2, nous observons que notre composé est plus stable dans la phase ferromagnétique Cu_2MnAl parce que l'énergie correspondante est la plus basse. Les paramètres d'équilibre tels que la constante du réseau a , le volume V_0 , le module de

compressibilité B et sa première dérivé B' qui correspond à l'état d'équilibre sont calculés en utilisant l'approche GGA-PBE sont groupés dans le tableau III.3.

Tableau III.3 Valeurs des calculs ferromagnétique, non ferromagnétique et anti ferromagnétique en utilisant GGA-PBE du paramètre de réseau d'équilibre a (Å), module de compressibilité B (GPa), sa dérivée (B'), et la différence d'énergie entre les états ferromagnétique et antiferromagnétique $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$ (meV), énergie de cohésion E_c (Ry) et l'énergie de formation E_f (Ry)

matériaux	structure	Méthode		a (Å)	B (GPa)	B'	E_c (Ry)	E_f (Ry)	ΔE (meV)
N₂BaCs	Hg ₂ CuTi	GGA-PBE	FM	7.25	39	4.87	-1.02	-0.17	
			NM	7.20	42	4.54	-0.96	-0.11	
			AFM	5.86	28	5.08	-0.91	-0.06	
	Cu ₂ MnAl	GGA-PBE	FM	7.14	38	4.53	-1.19	-0.34	14.96
			NM	7.08	37	3.88	-1.13	-0.28	
			AFM	5.67	36	4.44	-1.18	-0.33	
N₂BaRb	Hg ₂ CuTi	GGA-PBE	FM	6.98	42	4.85	-1.02	-0.19	
			NM	6.94	46	4.56	-0.97	-0.15	
			AFM	5.65	30	4.36	-0.89	-0.07	
	Cu ₂ MnAl	GGA-PBE	FM	6.69	38	4.27	-1.18	-0.36	33.81
			NM	6.92	41	4.13	-1.13	-0.30	
			AFM	5.53	36	4.63	-1.16	-0.34	

L'énergie de cohésion des solides est également calculée afin d'étudier la stabilité physique de la phase. C'est une mesure de la force qui lie l'ensemble des atomes à l'état solide. L'énergie de cohésion dans une phase donnée est définie comme la différence entre l'énergie totale de la phase particulière et la somme des énergies atomiques totales des atomes constituant le cristal.

$$E_c^{N_2BaX} = E_{tot}^{N_2BaX} - (2E_N + E_{Ba} + E_X) \quad (III.5)$$

Où $E_{tot}^{N_2BaX}$ est l'énergie totale des composés N_2BaX ($X=Cs, Rb$), et E_N , E_{Ba} , and E_X sont les énergies totales des atomes isolées. Les valeurs calculées obtenues pour l'énergie de cohésion aux constantes de réseau d'équilibre sont répertoriées dans le tableau III.3.

Les valeurs négatives de E_c pour les composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$) indique que nos composés devraient être stables en raison de la haute énergie des liaisons chimiques. Ainsi, il peut être synthétisé expérimentalement.

Dans le but d'estimer la stabilité chimique et examiner la possibilité de synthétiser les composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$), nous avons calculé l'énergie de formation E_f , par unité de formule. Cette énergie est définie comme étant la différence entre l'énergie du cristal et la somme des énergies des éléments constituant ce cristal dans leurs états standard. Elle peut être calculée en utilisant la relation suivante:

$$E_{N_2BaX}^{form} = E_{tot}^{N_2BaX} - (2E_N^{bulk} + E_{Ba}^{bulk} + E_X^{bulk}) \quad (III.6)$$

où $E_{tot}^{N_2BaX}$ l'énergie totale d'équilibre des composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$) dans les deux structures Heusler, et E_N^{bulk} , E_{Ba}^{bulk} et E_X^{bulk} sont les énergies de volume calculées des atomes N, Ba et $X=(Rb, Cs)$ dans leurs états standard. Les énergies de formation calculées pour tous les composés sont répertoriées dans le tableau III.3, les résultats illustrent que tous nos composés sont susceptibles de se former et leurs énergies de formation négatives indiquent leur stabilité thermodynamique.

III.4 Propriétés élastiques

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

L'étude des propriétés élastiques des solides est l'outil indispensable pour fournir des informations précieuses sur la stabilité structurale et les propriétés mécaniques des matériaux, selon des critères bien définis. Le comportement élastique des matériaux est généralement décrit par les modèles basés sur une loi de comportement élastique linéaire, dite loi de Hooke. Le calcul des constantes élastiques pour notre alliage est élaboré récemment par la méthode de Thomas Charpin implémentée dans le code WIEN2k [1]. 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 repose sur la méthode de M. Mehl, qui consiste à imposer la conservation du volume de l'échantillon sous l'effet de la pression [7].

Les constantes élastiques C_{ij} d'un système cubique doivent satisfaire les critères de stabilité de Born suivants [8] :

$$\begin{cases} C_{44} \geq 0 \\ C_{11} - C_{12} \geq 0 \\ C_{11} + 2C_{12} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

Dans ce travail, nous avons utilisé le code runwien [9] pour déterminer les constants élastiques de nos alliages N_2BaX ($X=Rb, Cs$).

Les valeurs obtenues pour les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de nos alliages sont listées dans le Tableau III.4. D'après les résultats précédents, et les critères de stabilité de Mehl, on remarque que les composés étudiés sont satisfaisants, tous les critères de la stabilité mécanique sont vérifiés, donc ils sont mécaniquement stables.

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

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

$$E = \frac{9BG}{3G+B} \quad (\text{III.8})$$

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

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

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

$$G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \quad (\text{III.10})$$

$$G_H = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (\text{III.11})$$

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

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

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

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (\text{III.13})$$

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

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

Les résultats des propriétés mécaniques de nos alliages sont obtenus en utilisant la GGA-PBE, qui sont représentés sur le tableau III.4.

Vu que les N_2BaX ($X=Rb, Cs$) ayant un module d'élasticité E élevé, ces derniers subiront une plus faible déformation avec module de cisaillement et un module de Young plus grand. Du point de vu de la ductilité et la fragilité, le rapport B/G est supérieur à la valeur critique 1.75 qui sépare le comportement ductile/fragile, ce qui classe nos matériaux comme des matériaux ductile.

Ces matériaux possèdent un module de compressibilité plus élevé, ce qui implique que les matériaux étudié sont difficiles à briser. On peut expliquer ce résultat par une faible distance interatomique qui entraîne une grande cohésion du cristal. Pour un cristal isotopique A est égal à 1, mais quand il existe une autre valeur supérieure ou inférieure à 1 ça signifie qu'il s'agit d'un cristal anisotrope [12], concernant nos composés, nous remarquons que le coefficient d'anisotropie a dépassé l'unité, ce qui indique un caractère anisotropique. La valeur, du coefficient de Poisson sont inférieures à 0.5 (la valeur maximale de ν), indiquant

que les composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$) sont parfaitement compressible. Les résultats obtenus sont comparés avec d'autres études disponibles. En général, les valeurs obtenues sont proches à ces dernières.

Tableau III.4 les constantes et les paramètres élastique

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B_V	B_R	B_H	G_V	G_R	G_H	E	ν	B/G
N_2BaCs	90.61	12.07	10.33	38.25	38.25	38.25	18.7	7.66	13.18	35.47	0.34	2.90
N_2BaRb	95.01	10.33	6.76	38.56	38.56	38.56	20.99	10.19	15.59	41.22	0.32	2.47

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

III.5 Propriétés électroniques

La compréhension de la structure électronique d'un matériau nécessite l'étude de la structure de bande électronique et La densité d'états partielle et totale (PDOS et TDOS) qui vont nous permettre d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau.

III.5.a Structure de bande

La relation de dispersion $E(k)$ présente une propriété très importante dans le cas des matériaux solides. Une des raisons les plus importantes pour calculer la structure de bandes électroniques est de déterminer la bande interdite (le gap d'énergie) qui représente la différence entre les valeurs des énergies de la bande de valence supérieure et le bande de conduction inférieure, car cela peut donner une idée sur les utilisations potentielles pour des applications de différents dispositifs. En utilisant la méthode FP-LAPW, nous avons calculé la structure des bandes électroniques figures III.3 et III.4 ainsi que la densité d'état figure III.5 et III.6 de nos composés suivant les directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin

D'après les Figures III.3(b) et III.4(b) nous constatons un chevauchement au niveau de Fermi (E_F) pour les spins minoritaires, qui présentent un comportement métallique (c-à-dire que le gap est nul). D'autre part, nos composés N_2BaX ($X=Rb, Cs$) possèdent un caractère semi-conducteur dans la direction des spins majoritaires Figures III.3(a) et III.4(a) où le maximum

de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne coïncident pas en même point de symétrie, ce qui signifie qu'il a un gap direct dans la direction des spins majoritaires autour du niveau de Fermi de valeur.

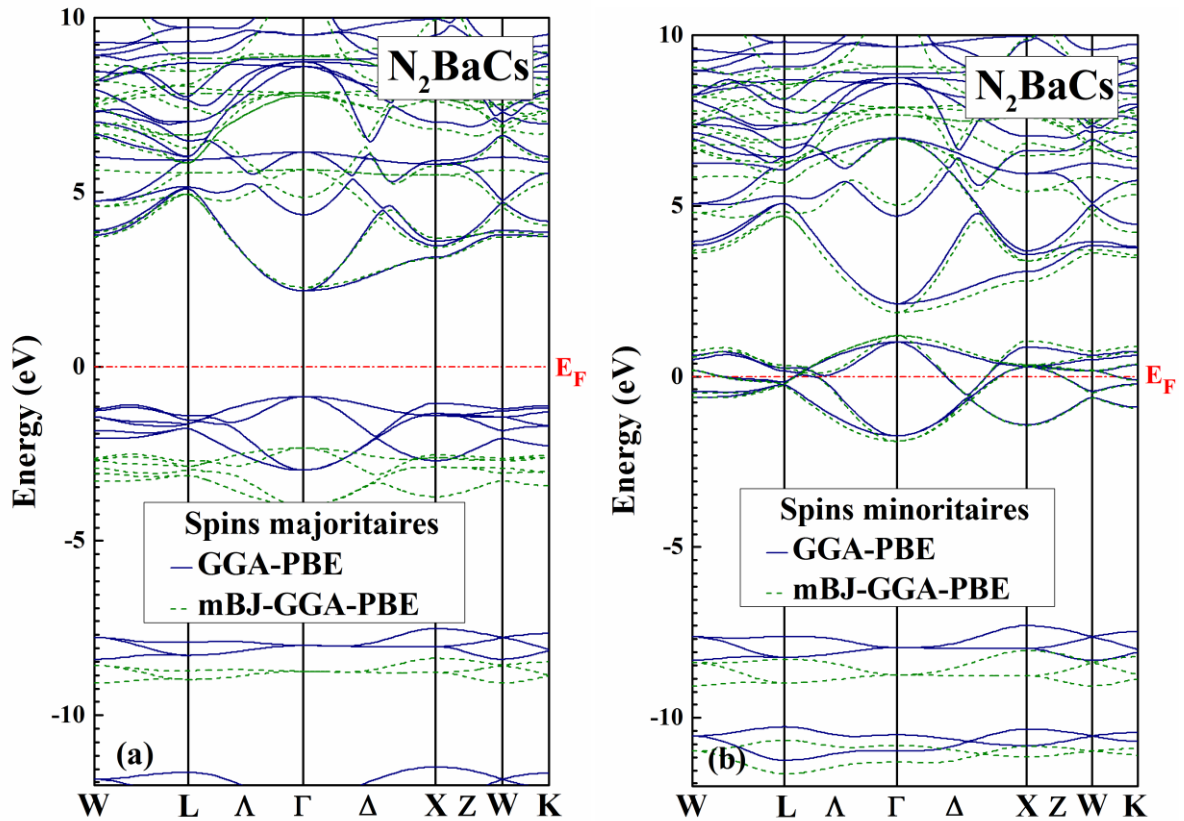


Figure III.3: Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du N_2BaCs (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.

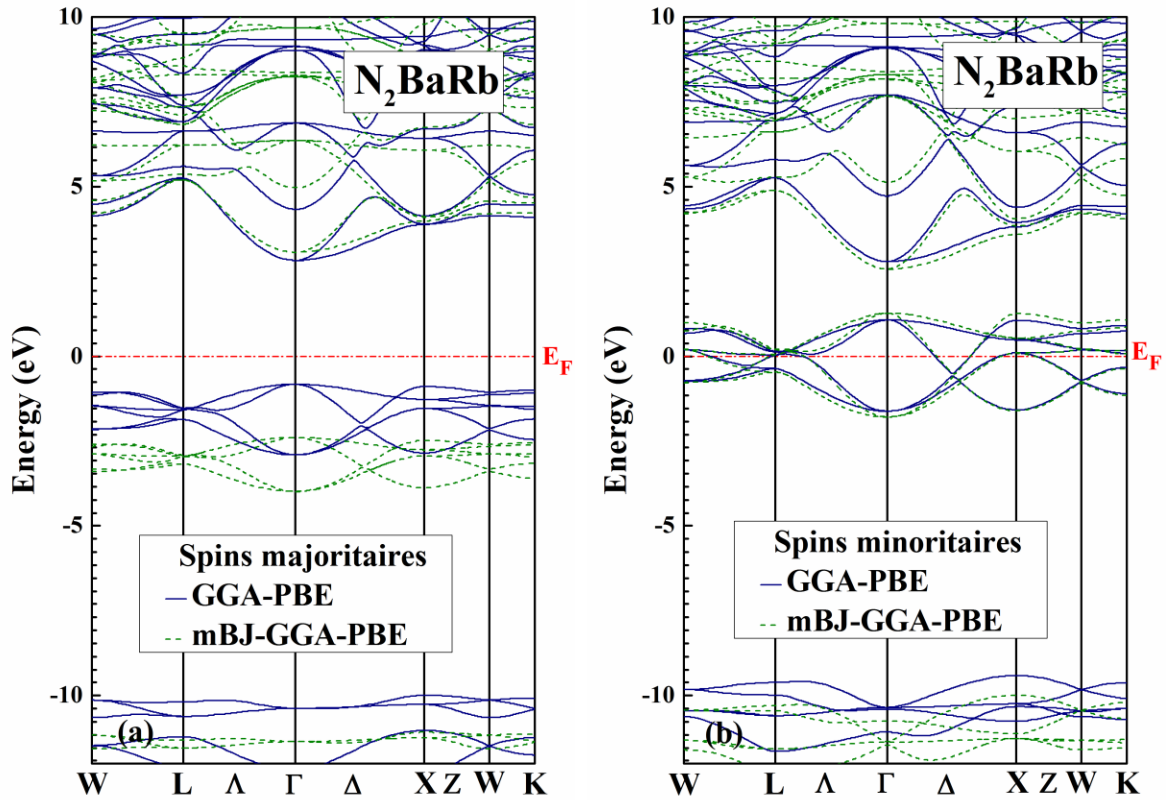


Figure III.4: Calcul spin-polarisé (SP) de la structure de bande du N_2BaRb (a) spin majoritaires, et (b) spin minoritaires. La ligne horizontale montre l'énergie de Fermi.

Tableau III.5 Valeurs du gap E_g (eV) en utilisant l'approximation GGA-PBE et mBJ-GGG-PBE

Matériaux	Méthode	E_g (eV)	Band gap
N_2BaCs	GGA-PBE	3.03	direct ($\Gamma - \Gamma$)
	mBJ-GGA-PBE	4.60	
N_2BaRb	GGA-PBE	3.66	direct ($\Gamma - \Gamma$)
	mBJ-GGA-PBE	5.44	

III.5.b Densité d'états

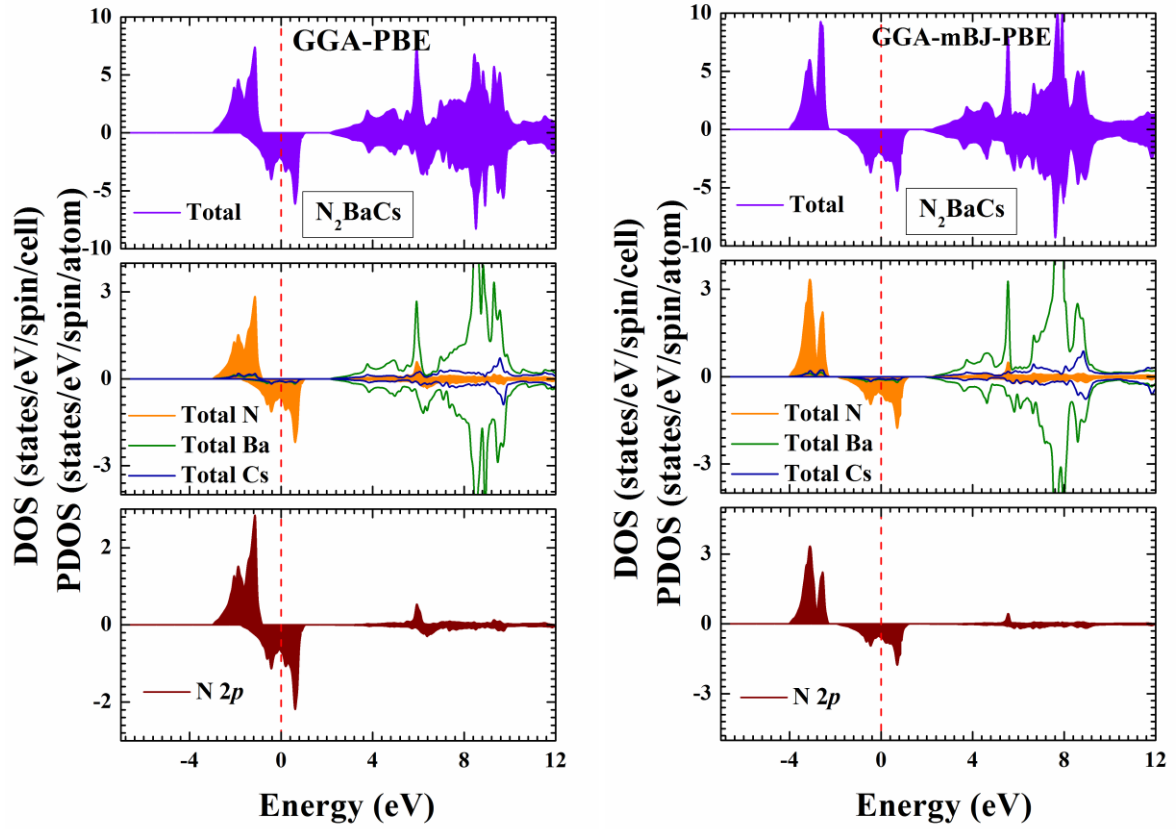


Figure III.5: Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du N_2BaCs La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.

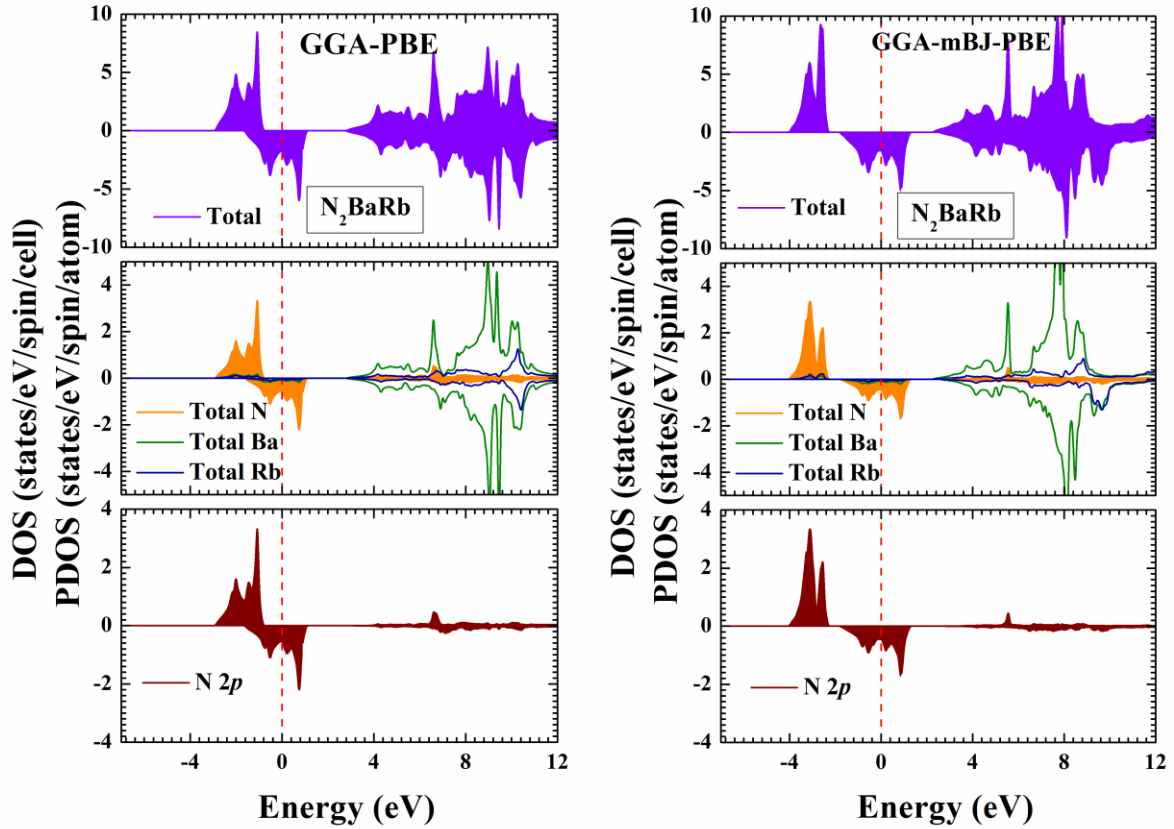


Figure III.6: Calcul spin-polarisé de la densité d'états totale et partielle du N_2BaRb . La ligne verticale (trait tiré) montre le niveau de l'énergie de Fermi. Les valeurs positives et négatives de la densité d'états représentent les états de spin-haut et spin-bas, respectivement.

La densité d'état électronique (DOS) est l'une des propriétés électroniques les plus importantes qui nous renseigne sur le comportement et le caractère électronique du système. Elle nous permet aussi de connaître la nature des liaisons chimiques entre les atomes d'un cristal ou d'une molécule. A partir des courbes de densités d'états partielles (PDOS) on peut déterminer le caractère prédominant pour chaque région.

Pour mieux comprendre la structure de bande, il est aussi intéressant de déterminer les densités d'états totales TDOS et partielles PDOS.

Le calcul de la densité d'états nécessite un grand nombre de points spéciaux (nous avons utilisé 5000 points spéciaux dans la zone de Brillouin).

Afin de vérifier l'exactitude des résultats de notre structure de bande, nous avons appliqué la méthode du tétraèdre pour calculer la densité d'états DOS. Les densités d'états totales TDOS et partielles PDOS pour $N_2BaX(X=Rb, Cs)$ correspondant à la structure de bande montrée précédemment sont présentées sur les Figure III.5 et III.6.

Nous avons appliqué à la fois les deux approximations GGA-PBE et GGA-mBJ-PBE. Les valeurs positives et négatives de la densité d'état sont projetées dans les deux polarisations de spin (haut et bas). Nous pouvons voir à partir des figures du spin-haut un certain nombre de sous-bandes qui se chevauchent, elles se divisent en deux groupes séparés par un écart d'énergie.

Le groupe inférieur forme les sous-bandes de la bande de valence, tandis que le supérieur forme celles de la bande de conduction. On note qu'il n'y a aucun gap de bande pour nos matériaux dans la polarisation spin-bas, ce qui atteste le caractère métallique puisque la densité d'états (DOS) a une valeur non nulle au niveau de Fermi, ce qui reproduit le caractère ferromagnétisme demi métallique dans nos composés.

III.6 Propriétés magnétiques

Nous avons calculé le moment magnétique total et partiel aussi bien dans la région interstitielle que dans la région sphérique pour les composés $N_2BaX(X=Cs, Rb)$, les résultats sont regroupés dans le Tableau III.6. Le moment magnétique total calculé est un entier, avec une valeur de $3\mu_B$ (magnétons de Bohr) par unité de formule pour $N_2BaX(X=Cs, Rb)$ (moment magnétique total), ce qui est également une caractéristique typique des composés demi métalliques ferromagnétiques.

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

Tableau III.6 Valeurs des moments magnétiques, μ_{Total} (μ_{B} /molécule), par atome μ_{Ba} , μ_{N} , μ_{Rb} et μ_{Cs} (μ_{B})

Matériaux	Méthode	μ_{inters} (μ_{B})	M_{N} (μ_{B})	M_{Ba} (μ_{B})	M_{X} ($X=\text{Rb},$ Cs)(μ_{B})	μ_{tot} (μ_{B})
N₂BaCs	GGA-PBE	0.35	1.31	0.01	0.02	3.00
	mBJ-GGA-PBE	0.03	1.53	-0.06	-0.03	3.00
N₂BaRb	GGA-PBE	0.35	1.30	0.02	0.03	3.00
	mBJ-GGA-PBE	0.03	1.53	-0.06	-0.03	3.00

II.7 Conclusion

Dans ce travail, l'optimisation structurale de l'énergie totale du composé montre que la structure à l'état ferromagnétique (FM) est plus stable par rapport à celles de non-ferromagnétique (NF) et anti-ferromagnétique (ANF). Pour les propriétés électroniques, la structure de bandes du composé montre une transition directe [gap indirect ($\Gamma \rightarrow \Gamma$)]. La densité d'état totale (DOS) de nos composés montre qu'il existe pas une symétrie entre le spin haut (\uparrow) et le spin bas (\downarrow) ce qui confirme clairement le caractère magnétique de ces composés.

REFERENCES

- [1] D. Singh, "Plane waves, pseudopotential and the LAPW method. Boston, Dordrecht," ed: London: Kluwer Academic Publishers, 1994.
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Physical review*, vol. 140, p. A1133, 1965.
- [3] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas," *Physical review*, vol. 136, p. B864, 1964.
- [4] P. Blaha, "WIEN 2 k," An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, 2001.
- [5] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Perdew, burke, and ernzerhof reply," *Physical Review Letters*, vol. 80, p. 891, 1998.
- [6] F. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 30, pp. 244-247, 1944.
- [7] J.F. Nye, *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*, Oxford University Press, Oxford, 1985.
- [8] W. A. Harrison, *Solid state theory: Courier Corporation*, 1980.
- [9] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, "Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces," *Physical review letters*, vol. 100, p. 136406, 2008.
- [10] H. B. Pedersen and J. L. Knudsen, *Eur. J. Phys.* 38, 045003 (2017).
- [11] Z. E. WU ZJ, H. XIANG, X. HAO, X. LIU and J. MENG, *Phys. Rev. B* 76, 054115 (2007).
- [12] F. Peng, L. Han, H. Fu and X. Cheng, *Phys. Status Solidi B* 246, 1590 (2009).

Conclusion Générale

Dans ce travail, nous avons étudié théoriquement les propriétés structurales, électroniques, élastiques et magnétiques des composés full Heusler N_2BaX ($X=Rb, Cs$), via la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec potentiel complet (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et de corrélation est traitée par l'approximation du gradient généralisé (GGA). L'optimisation structurale de l'énergie totale du composé montre que la structure à l'état ferromagnétique (FM) est plus stable par rapport à celle de l'état non ferromagnétique (NM) et antiferromagnétique (AFM). D'après les propriétés électroniques, les résultats montrent que nos composés, les structures de bande spin-bas sont métalliques, alors que celles du spin-haut sont décrites par une bande interdite (un gap) au niveau de Fermi, avec un moment magnétique total entier de $3 \mu_B$.

Le comportement élastique est d'un très grand intérêt pour divers domaines technologiques. Nos résultats montrent que les constantes C_{ij} sont toutes positives. Les modules d'élasticité sont calculés suivant l'approximation de Hill, les résultats obtenus pour le module de compression B , le module de cisaillement G et le module de Young E , montrent que nos composés sont ductile, anisotrope et mécaniquement stable.