

# Soutenance de Mémoire de Master en Physique

**Présentée par**  
**BELAHCENE Wafa**

**Intitulé:**

**Structures électroniques et origine du gap des alliages  
Heusler de type XYZ (X=Ni, Y=Mn, Cr, V et Z=Sb)  
Calcul ab-initio**

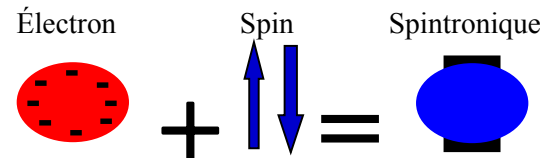
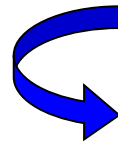
**Encadré par :**  
**M<sup>r</sup> A. BOUKRA**

- Introduction
- ✓ Matériaux ferromagnétiques
- ✓ Demi-métal
- ✓ Modèle du champ cristallin
- ✓ Alliages Heusler
- Alliages half-Heusler NiYSb ( Y=Mn, Cr, V ) :  
Etude ab-initio
  - ✓ Propriétés structurales
  - ✓ Propriétés électroniques
  - ✓ Propriétés magnétiques
  - ✓ Origine du gap
- Conclusion

Electronique classique

GMR

Charge électronique et le spin peuvent être combinés pour former une nouvelle classe de composants électroniques.

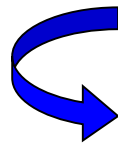


« La spintronique »

Alliage Heusler

Full-Heusler  
( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ )

Half Heusler  
( $\text{NiMnSb}$ )



- Demi-métallique
- $T_c$  élevée
- Mémoire à forme magnétique

## Magnéto-résistance Géante (GMR)

### Nobel Prize in Physics 2007



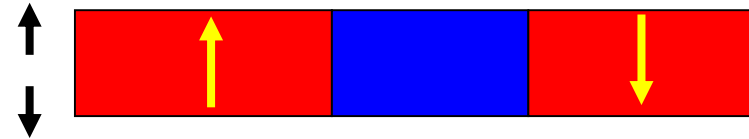
Peter Grünberg

Albert Fert

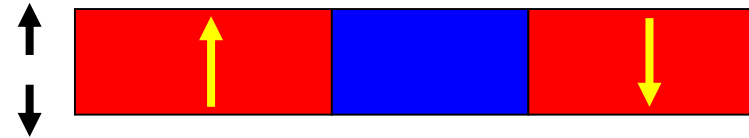
FM

NM

FM



Etat parallèle: résistance faible



Etat antiparallèle: résistance forte

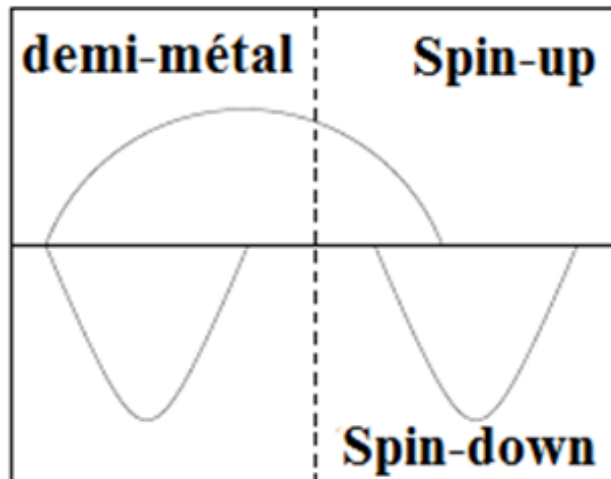
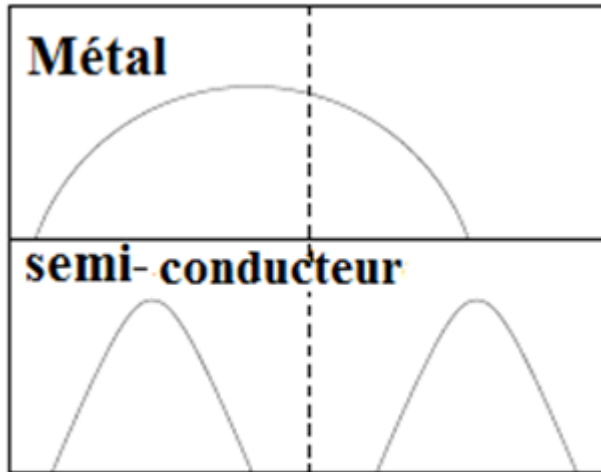
variation de la résistance de l'empilement sous l'effet  
d'un champ magnétique.

A. Fert, Phys. Rev. Lett., 61 (1988)

P. Grünberg, Phys. Rev. B, 39 (1989)

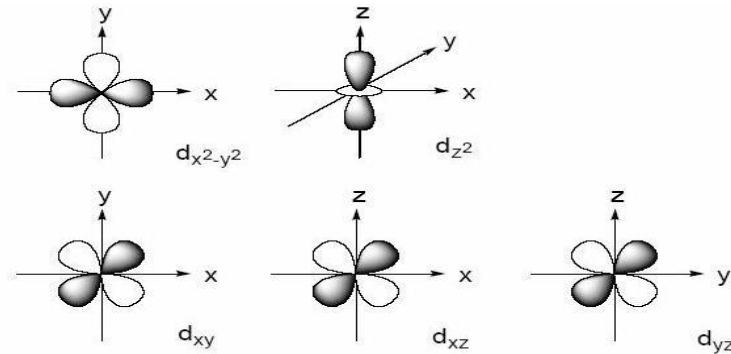
**une découverte qui a révolutionné les techniques  
permettant de lire l'information stockée sur DD.**

# Demi-métal

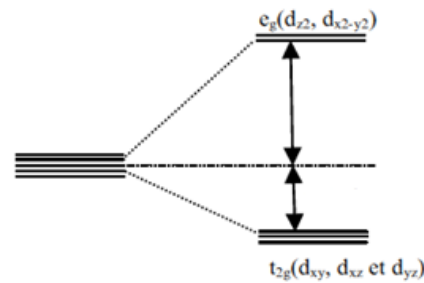
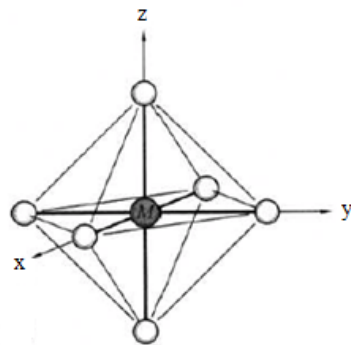


$$p = \frac{N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)}{N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)}$$

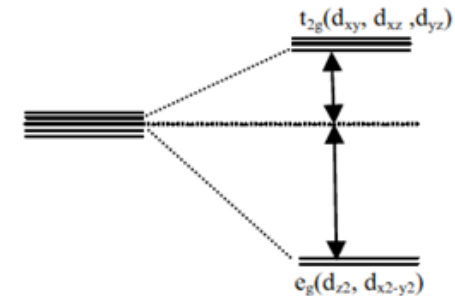
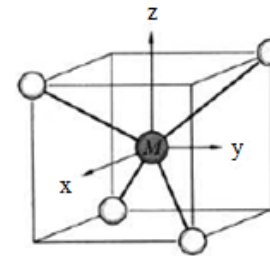
**P=100%**



## Les cinq orbitales d

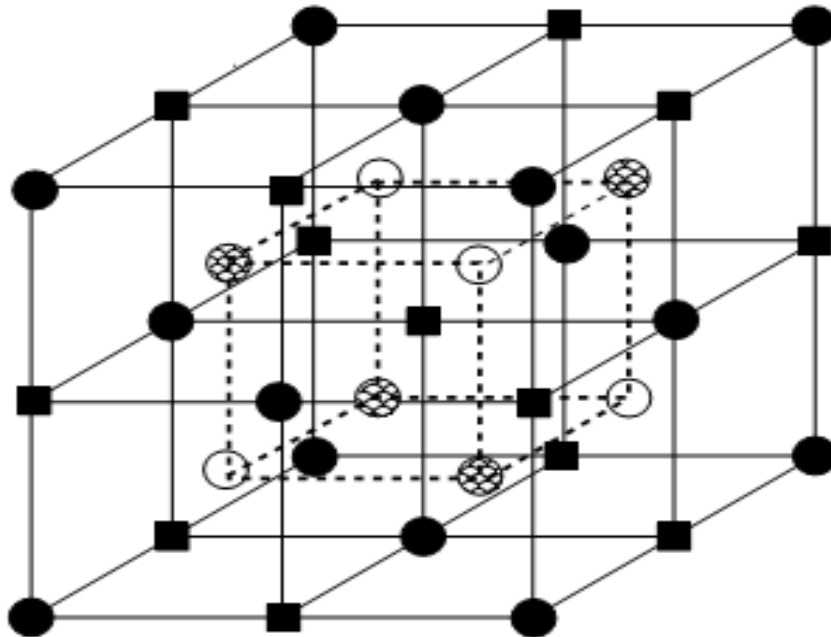


Champ cristallin octaédrique



Champ cristallin tétraédrique

# Structure cristalline des alliages Heusler



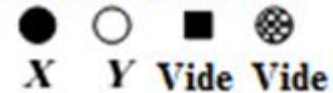
## Full-Heusler $L2_1$



## Half-Heusler $C1_b$



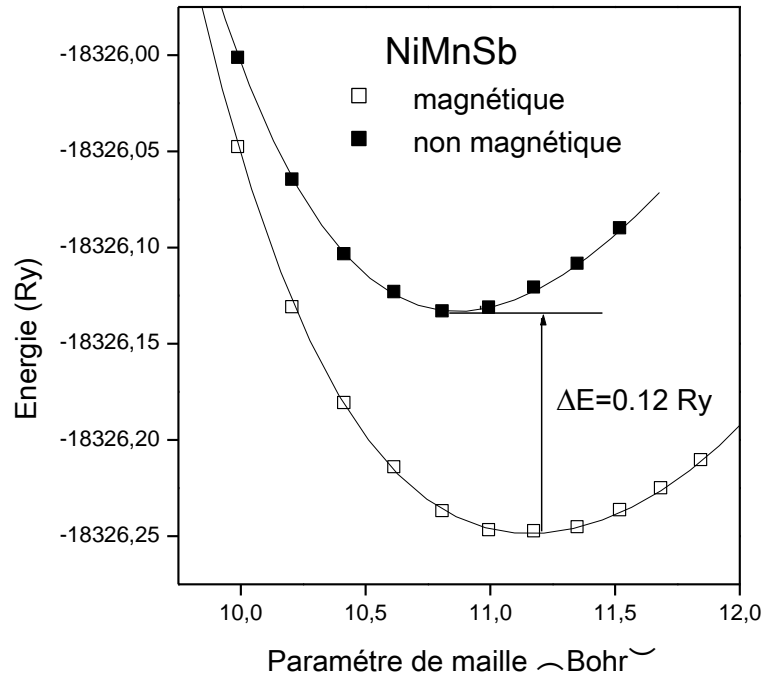
## Zinc blend



# Les alliages Heusler

$X_2YZ$  Heusler compounds

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



		NiMnSb	NiCrSb	NiVSb
<b>a</b> éq (Bohr)	Présent calcul	11.15	11.11	11.13
	Autre calcul	11.17 <sup>a</sup> 11.2 <sup>b</sup>	11.14 <sup>a</sup>	11.15 <sup>a</sup> 10.93 <sup>b</sup>
	Expérimental	11.16 <sup>a</sup>		
<b>B (GPa)</b>		113.42	116.34	129.70

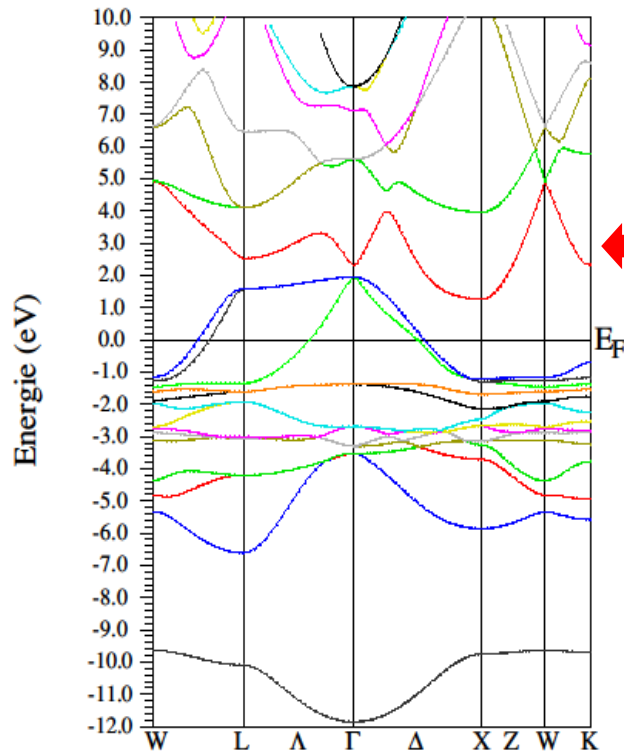
- *Approximation GGA*
- *Code Wien2k*
- *Nombre de K-point=200*
- *Précision=10<sup>-4</sup>*

<sup>a</sup>L. Marjana, Master of science, 2005.

<sup>b</sup>K. Chandra, Université de Mainz, Allemagne, 2007.

## ➤ Structure de bandes

NiMnSb-spin majoritaires

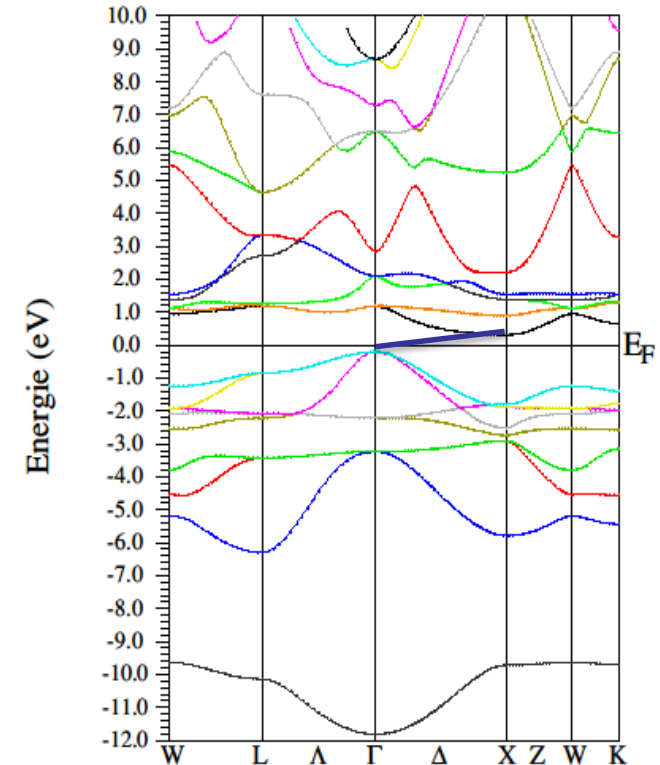


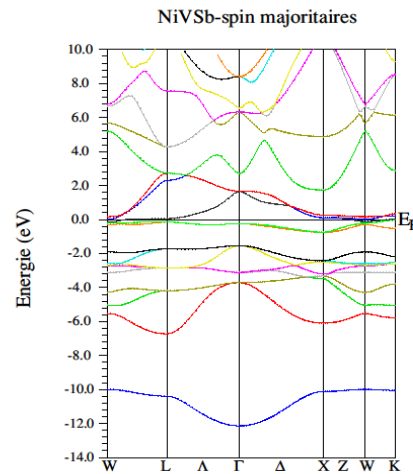
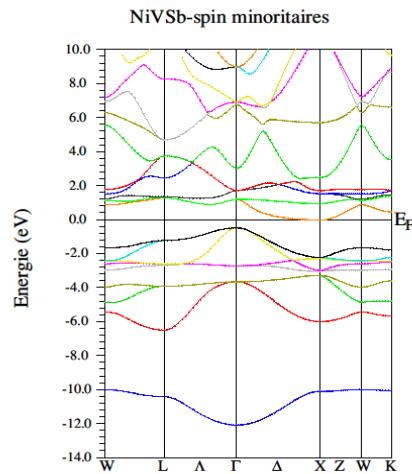
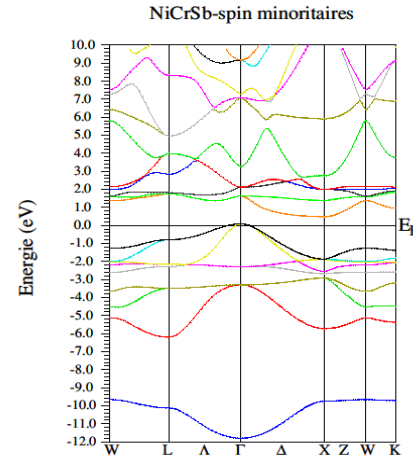
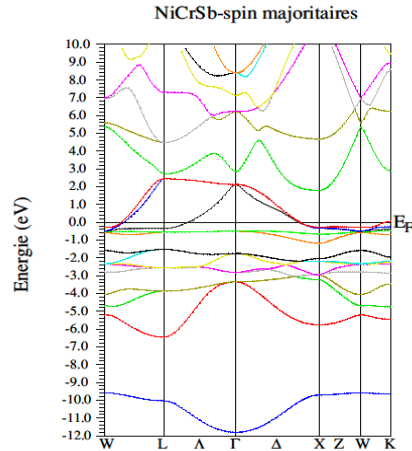
**Comportement demi  
métallique.**

❖ Métallique (Spin  
Majoritaires)

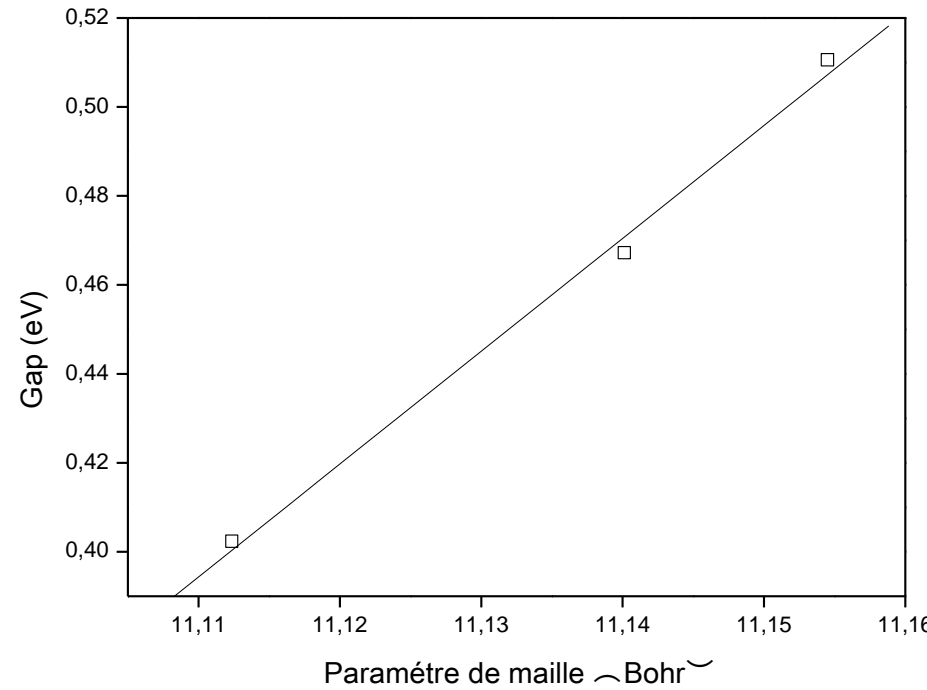
❖ Semi-conducteur  
(Spin Minoritaires)

NiMnSb-spin minoritaires





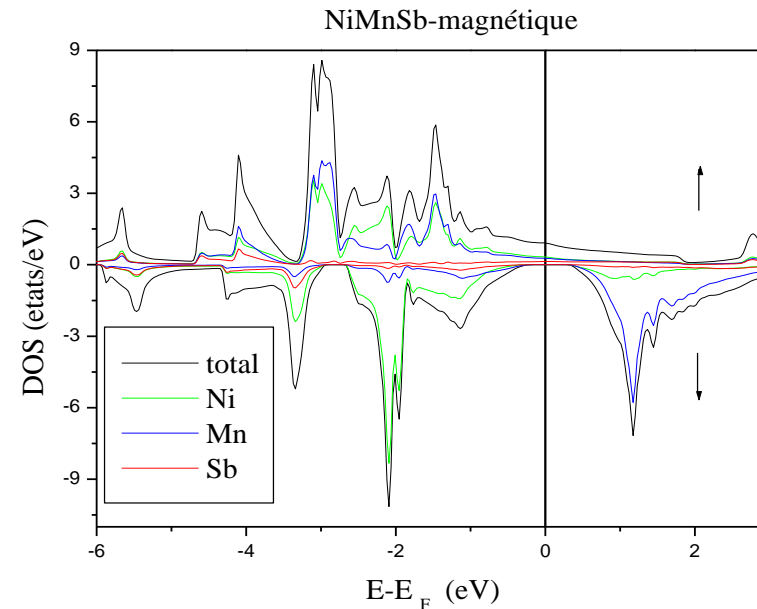
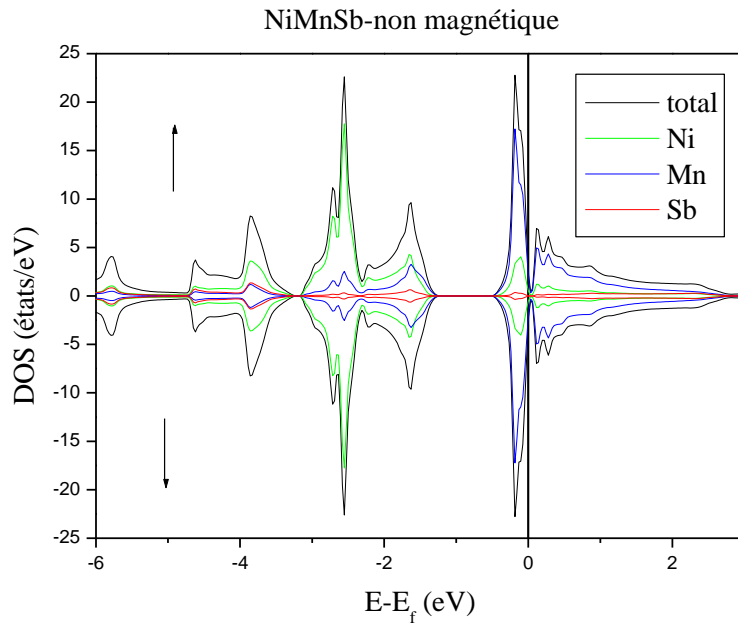
Alliage	$a_{\text{éq}}$ (Bohr)	Gap (eV)		
		Notre calcul	Autre calcul	Exp
NiVSb	11.14	0.46		
NiCrSb	11.11	0.40		
NiMnSb	11.15	0.51	0.5 <sup>a</sup>	0.4 <sup>b</sup>



<sup>a</sup> I.Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B 66, 2002.

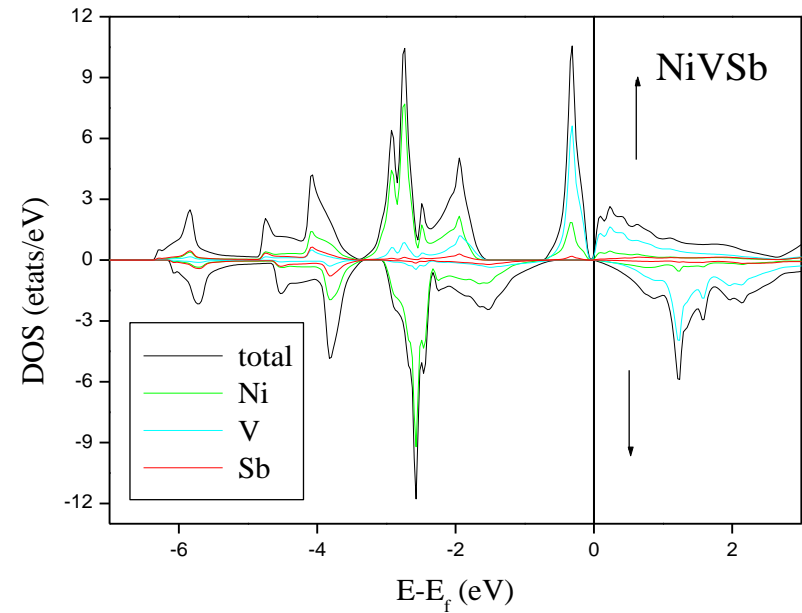
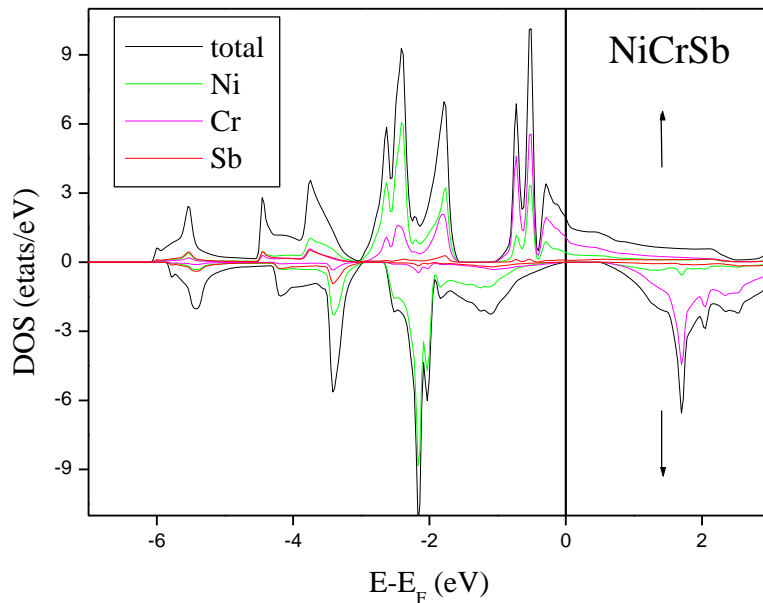
<sup>b</sup> M.M.Kirillova,A.A.Makhnev,E.I.Shreder,V.P. Dyakina,andN.B.Gorina.Phys.Stat.Sol.(b), 187:231,1995.

## ➤ Densité d'états



**P = 100%**

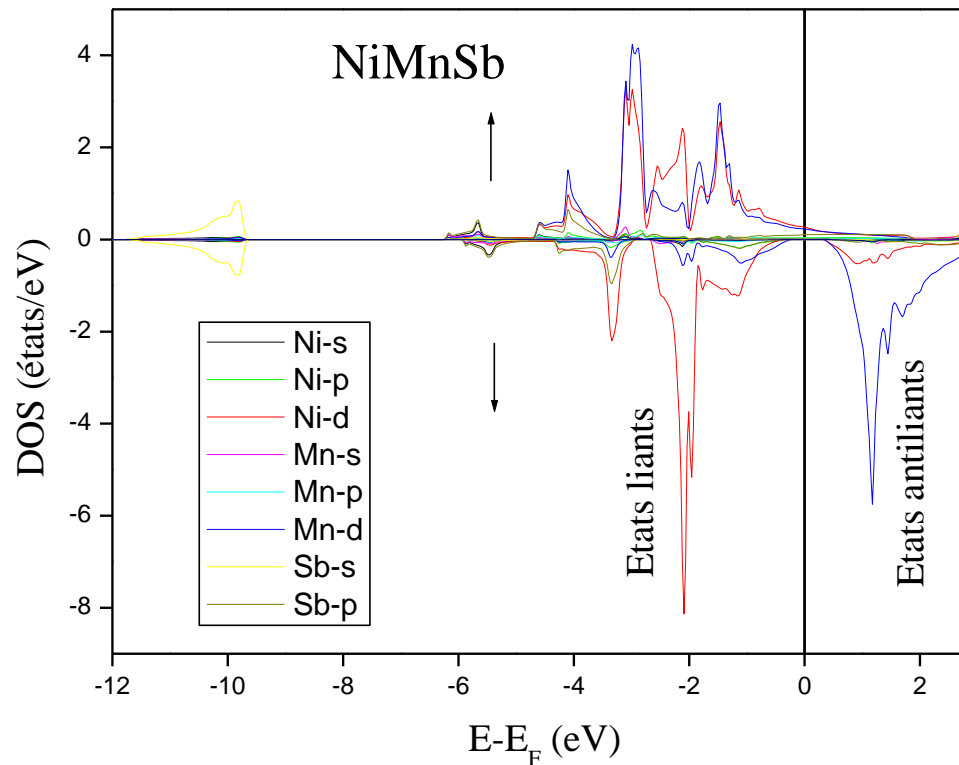
## ➤ Densité d'états



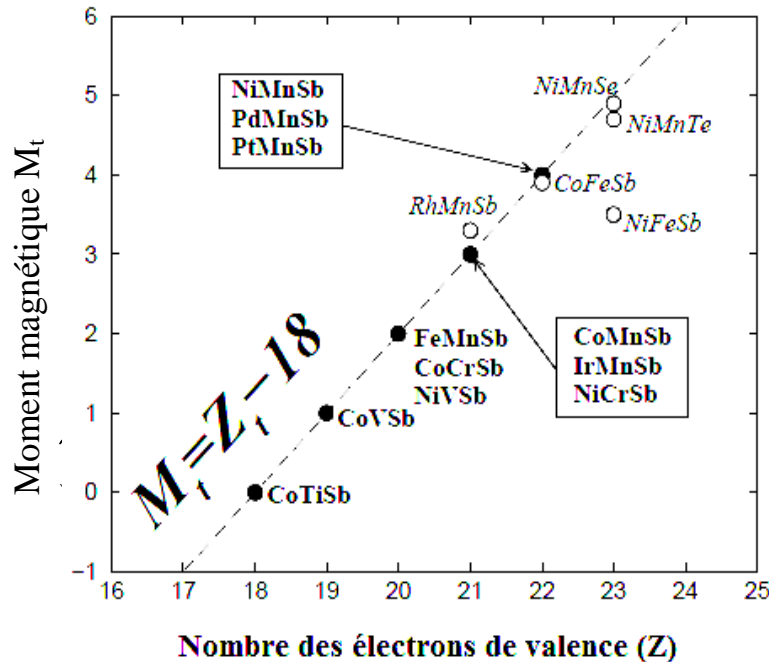
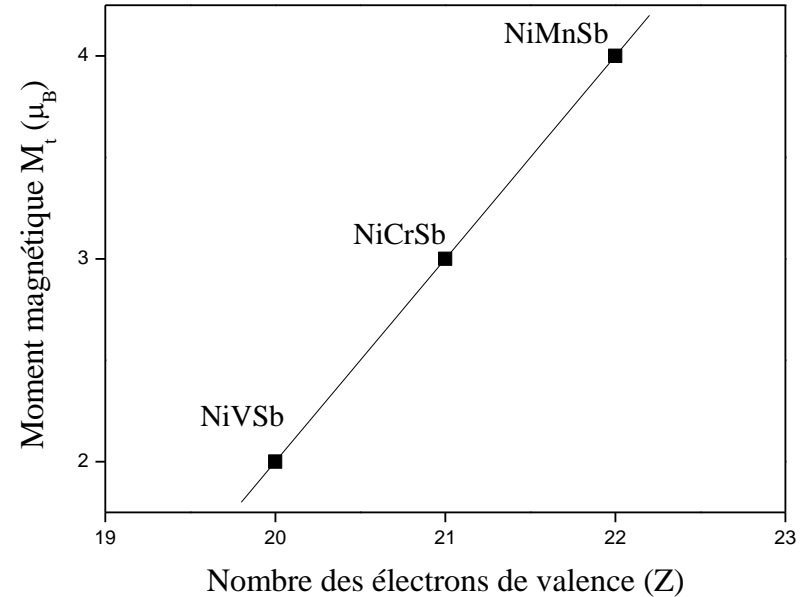
**P = 97%**

**P = 89%**

## ➤ Densité d'états

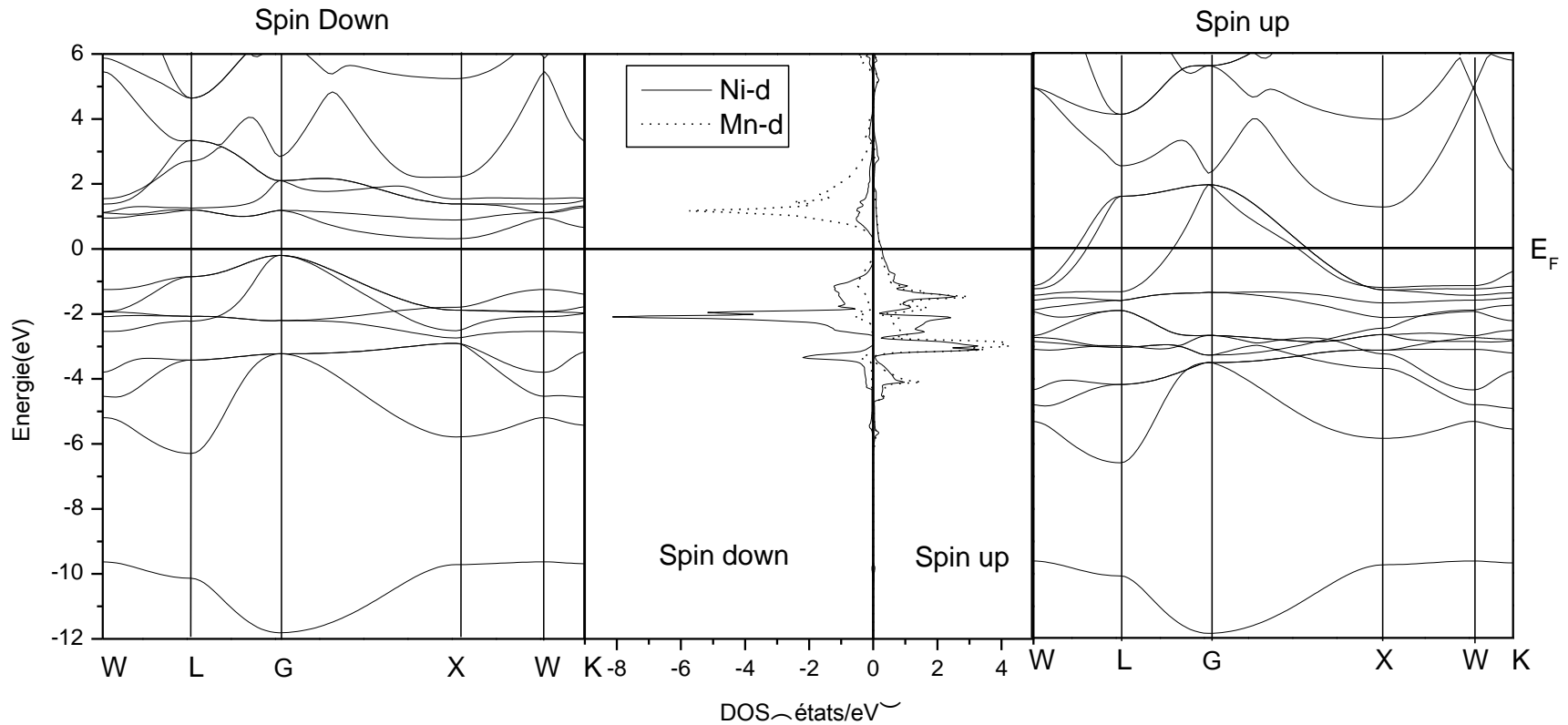


Alliage	Nombre d'électrons de valence (Z)	$M_t$ ( $\mu_B$ )
NiVSb	20	2
NiCrSb	21	3
NiMnSb	22	4

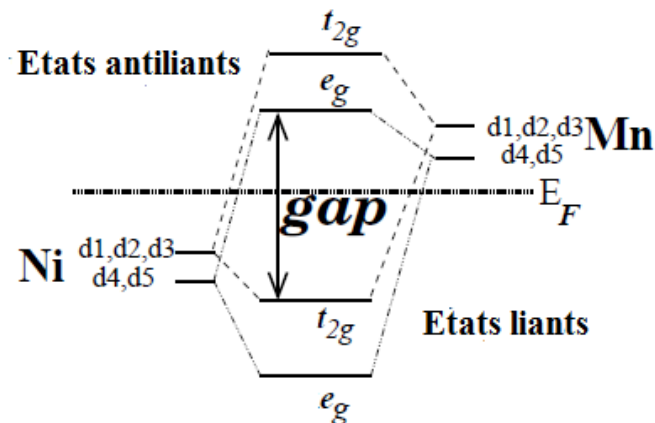
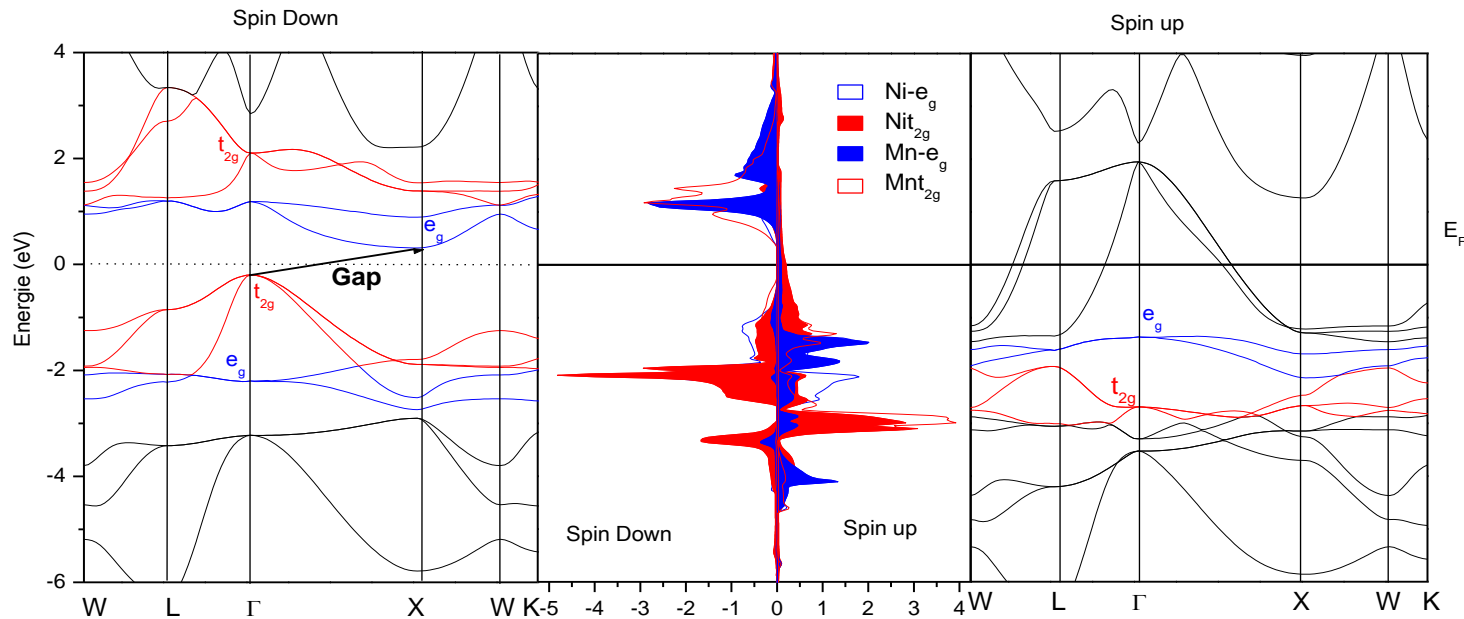


Loi de Slater Pauling:

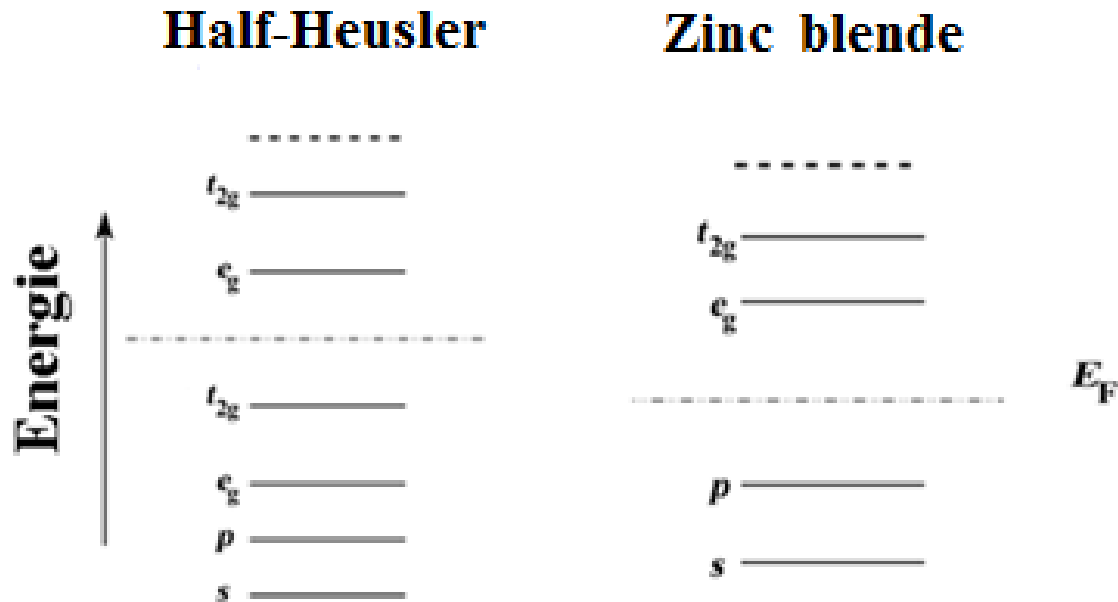
$$M_t = Z - 18$$



# Origine du Gap



# Origine du Gap



Les alliages half-Heusler de type NiYSb (Y=Mn, Cr, V) présentent:

- ✓ Une structure stable à l'état magnétique.
- ✓ Un caractère demi-métallique.
- ✓ Une polarisation en spin élevée, allant jusqu'à 100%.
- ✓ Une variation du moment qui suit la règle de Slater Pauling
- ✓ Gap indirecte dans la direction  $\Gamma$ -X.
- ✓ Un gap originaire des états  $t_{2g}$  liants et  $e_g$  anti-liants des métaux de transition

# Merci de votre attention