

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



جامعة سعيدة – د. مولاي الطاهر
UNIVERSITÉ DE SAÏDA - Dr MOULAY TAHAR

كلية العلوم والتكنولوجيا
Faculté des Sciences et Technologie

قسم علوم المادة
Département de Science de la matière

MEMOIRE

Elaboré en vue de l'obtention du diplôme de master en Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Intitulé :

Etude Ab-Initio des Propriétés Electroniques et Magnétiques des Heuslers Quaternaires FeCrTiX (X = Sn, Sb)

Présenté par :

ROUACHED Abdelali

Soutenu le 19/06/2025 devant le jury composé de :

M. ELKURTI Mohammed	Université de Saïda - Dr MOULAY Tahar	Président
M. BADOUI Abdelhamid	Centre Universitaire de Naâma – SALHI Ahmed	Encadrant
M. BOUTALEB Habib	Université de Saïda - Dr MOULAY Tahar	Co- Encadrant
M. ZEMOULI Mustapha	Université de Saïda - Dr MOULAY Tahar	Examineur

Année universitaire 2024/2025

Remerciement

Tout d'abord, je remercie ALLAH le Dieu Tout-Puissant de m'avoir donné ce courage.

La volonté et la patience de mener à bien ce travail en cours. Ce travail a été réalisé en

Faculté des Sciences, Département de Physique, Université Dr. Moulay Tahar, Saida.

Je tiens à remercier tout d'abord Dr **BADAoui Abdelhamid** pour avoir encadré cette mémoire et le professeur **BOUTALEB Habib**.

Tout au long de cette année, il a su orienter mes recherches aux bons moments et Il a offert ses sages conseils qui ont conduit à la production de cette mémoire.

Je le remercie beaucoup pour tout cela, pour sa confiance et sa présence. Je tiens à remercier tous les professeurs du département de physique pour tout ce qu'ils nous ont apporté au fil des années.

Enfin, ces remerciements ne seraient pas complets sans mentionner toute ma famille et Mes amis, dont les encouragements et le soutien moral m'ont permis de faire cela.

Ce souvenir dans les bonnes conditions.

Merci à tous !

Dédicace

Grâce à mon Dieu

Je dédie ce modeste travail en signe de reconnaissance et de respect à :

Les plus chères personnes dans la vie : ma mère et mon père.

Toute ma famille ; chacun par son nom.

Tous les professeurs de l'université de SAIDA.

Mes amis et collègues et tous ceux qui m'ont encouragé.

A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

Résumé

Dans ce travail, nous avons mené une étude sur le composé Heusler FeCrTiX ($X = \text{Sn}, \text{Sb}$) afin de déterminer ses propriétés structurales, électroniques, et magnétique en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées en potentiel complet (FP-LAPW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), mise en œuvre dans le code WIEN2k. Le potentiel d'échange-corrélation a été estimé à l'aide de l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE). Les calculs structuraux ont montré que le paramètre de maille calculé est en bon accord avec les valeurs rapportées dans la littérature. Les propriétés électroniques révèlent que le composé présente un comportement demi-métallique, ce qui est cohérent avec les résultats expérimentaux.

Mots clés : Heusler, DFT, WIEN2k, propriétés électroniques, propriétés optiques, demi métal, GGA

Abstract

In this work, we conducted a study on the Heusler compound FeCrTiX (X = Sn, Sb) in order to determine its structural, electronic, and magnetic using the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method, within the framework of Density Functional Theory (DFT), implemented in the WIEN2k code. The exchange-correlation potential was estimated using the Generalized Gradient Approximation (GGA-PBE). Structural calculations showed that the computed lattice parameter is in good agreement with previously reported values. The electronic properties revealed that the compound exhibits half-metallic behavior, which is consistent with experimental data.

Keywords: Heusler, DFT, WIEN2k, electronic properties, optical properties, half-metal, GGA

ملخص

الإلكترونية, من أجل تحديد خصائصه الهيكلية Heusler FeCrTiX X(Sn,Sb) في هذا العمل ، أجرينا دراسة على مركب ، بناءً على النظرية الوظيفية للكثافة (الموجة الخطية المعززة الكاملة المحتملة) FP-LAPW والمغناطيسية باستخدام طريقة (GGA-). لقد قدرنا إمكانات الارتباط التبادلي من خلال تقريب التدرج المعمم WIEN2k. تنفيذه في رمز وتم (DFT) يكشف حساب الخصائص . تكشف الخصائص الهيكلية أن ثابت الشبكة المحسوب يتوافق جيداً مع قيمة الحساب الأخرى (PBE). الإلكترونات أن المركب عبارة عن نصف وهو ما يتوافق مع القيمة التجريبية.

الكلمات المفتاحية: DFT ، FP-LAPW ، Heusler ، نصف معدن ، الخواص الإلكترونية.

TABLE DES MATIERES

Remerciements	03
Dédicace	04
Résumé	05
Abstract	06
ملخص	07
Table des matières	08
Introduction Générale.....	10
Références bibliographique	16

Chapitre I. Les généralités sur les Heusler

I.1.Introduction.....	18
I.2. Généralités sur les composés Heusler.....	18
I.3. Alliages semi-Heusler (<i>Half-Heusler</i>).....	19
I.3.1. Alliages Full-Heusler.....	19
I.3.2. Structure cristalline des alliages Half-Heusler	20
I.4. Composés Demi-Heusler Doubles.....	21
I.4.1. Propriétés Thermiques et Électroniques.....	21
I.5. Composés Demi-Heusler Triples.....	22
I.6. Le composé quaternaire.....	22
I.7. Spintronique et ses applications.....	23
I.8. Conclusion.....	24
Références bibliographiques.....	25

Chapitre II. Les Méthodes de calcul

II.1. THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE (DFT)	28
II.2. L'équation de Schrödinger	28
II.3. Approximation de Born-Oppenheimer (1927).....	29
II.4. Approximation de Hartree-Fock (1930).....	30
II.5. Théorie de Fonctionnelle de Densité (DFT).....	30
II.5.1. Théorème de Hohenberg et Kohn.....	31
II.5.2. Méthode de Kohn et Sham.....	31
II.5.3. Approximation de la densité locale (LDA)	34

TABLE DES MATIERES

II.5.4. Approximation du Gradient Généralisé (GGA).....	34
II.6. Méthode de calcul.....	35
II.6.1. Introduction.....	35
II.6.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....	36
II.6.3. Principe de la méthode LAPW.....	38
II.6.4. La méthode de l'onde plane augmentée linéarisées (FPLAPW).....	38
II.6.5. Le concept de la méthode FP-LAPW.....	39
II.7. Le code Wien2k.....	40
II.8. Conclusion.....	42
Références bibliographiques.....	43

Chapitre III. Résultats et discussion

III.1. Introduction	46
III.2. Détails de calcul.....	46
III.3. Propriétés structurales.....	47
III.4. Etude des propriétés électroniques.....	49
III.4.1. Structure de bande.....	49
III.4.2. Densités d'états totaux et partiels (DOS).....	51
III.5. Propriétés magnétiques.....	52
Références bibliographiques.....	53
Conclusion général.....	54

INTRODUCTION

GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Les dernières années ont été témoin d'un immense développement dans le domaine de la physique des semi-conducteurs qui joue un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne cesse de progresser au vu de la recherche moderne.

L'un des enjeux principaux de la science des matériaux réside dans la quête de nouveaux semi-conducteurs aux caractéristiques structurales et électroniques idéales pour faire progresser les applications optoélectroniques comme les panneaux solaires à couches minces ou les diodes laser. On a longtemps vu dans les semi-conducteurs des groupes II-VI et III-V une grande promesse pour les dispositifs utilisés dans les technologies électroniques et optoélectroniques. L'utilisation restreinte de certains semi-conducteurs binaires dans plusieurs domaines a poussé les chercheurs à explorer d'autres pistes avec des matériaux prometteurs. Une catégorie particulièrement captivante de matériaux est représentée par les composés half-Heusler, également appelés « Nowotny – Juza » [1], qui possèdent une composition chimique XYZ.

Heusler a réalisé la première fabrication du composé Heusler Cu_2MnAl en 1903. De façon inattendue, le composé présente une propriété ferromagnétique, bien que aucun de ses composants individuels ne montre une activité magnétique autonome [2,3]. On désigne aujourd'hui cette remarquable catégorie de matériaux (une large collection de plus de 1500 composés) sous les noms de composés Heusler et Half-Heusler (ou semi-Heusler). Étonnamment, on peut prédire leurs caractéristiques simplement en dénombrant le nombre d'électrons de valence [4].

Si les composants X, Y et Z disposent d'un total de huit (8) électrons de valence, ils établissent une structure essentiellement stable. L'élément le plus électropositif, X, transfère n électrons de valence aux éléments qui sont les plus électronégatifs, Y et Z. Ainsi, la catégorie des composés Half-Heusler à huit électrons englobe un vaste ensemble de semi-conducteurs dont les bandes interdites présentent une variabilité considérable [5]. Les états stables à huit électrons similaires sont à l'origine des bandes interdites observées dans les semi-conducteurs binaires de type II-VI ou III-V. À ce jour, une poignée restreinte de la vaste classe de composés Half-Heusler à huit électrons potentiels des types I - II - V et I - III - IV a été mise en synthèse [6]. Ils ont aussi été examinés par le biais de calculs *ab initio* [7-8]. Plusieurs recherches théoriques et expérimentales ont démontré que les caractéristiques physiques des phases Half-Heusler sont étroitement liées à la particularité de la structure électronique [9]. Les composés XYZ jusqu'à octobre 2023 ont été utilisés pour l'entraînement. 18 électrons de valence tendent fortement à exhiber des comportements semi-conducteurs.

INTRODUCTION GENERALE

Les composés ternaires Half-Heusler (HH), dotés d'une bande interdite étroite, ont démontré être une catégorie essentielle de matériaux récemment grâce à l'éventail diversifié de propriétés physiques captivantes. Notre recherche se focalise précisément sur les Half-Heusler XYZ, avec une attention particulière portée sur leur composé ternaire intégrant l'atome de Li. Nous nous intéressons à cette étude en raison de leurs perspectives d'application dans des domaines tels que la production thermoélectrique, la spintronique, les semi-conducteurs non magnétiques, l'optoélectronique, entre autres. Considérés aussi comme des semi-conducteurs avec bande interdite directe et indirecte, ils possèdent des caractéristiques comme la capacité de moduler leur bande interdite. Toutes ces propriétés et bien plus encore nous motivent à réaliser des calculs *ab initio* pour déterminer les caractéristiques de ce composé.

Il est indispensable d'assigner correctement les sites atomiques dans la structure cristalline pour analyser et comprendre les caractéristiques de ces composés Half-Heusler. Habituellement, les phases Half-Heusler se cristallisent dans une structure non centrée, correspondant à l'espace F43-m, numéro 216. La structure est de type MgAgAs, ou C1b. La structure Half-Heusler est une version ternaire ordonnée de la structure cristalline CaF₂. Dans la configuration Half-Heusler, les atomes situés aux positions Wyckoff 4a (0, 0, 0) et 4b (1/2, 1/2, 1/2) constituent une sous-structure ionique semblable à celle du NaCl, tandis que ceux aux positions 4a et 4c (1/4, 1/4, 1/4) forment une sous-structure covalente comparable à celle du ZnS [10].

L'objectif de cette mémoire est d'aboutir à une meilleure compréhension des propriétés structurales, élastiques et électroniques, du composé Heusler *FeCrTiX* (*X = Sn, Sb*). Les méthodes *ab-initio* nous permettent de décrire le comportement énergétique du matériau à partir des premiers principes. Il suffit, en effet, de connaître la composition du matériau pour pouvoir le simuler à partir de la résolution des équations de la mécanique quantique.

La théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**), une méthode parmi les approches *ab-initio*, est bien adaptée à la modélisation des solides grâce à l'importante simplification qu'elle offre pour résoudre l'équation de Schrödinger du système concerné. Hohenberg et Kohn [11] ont formulé cette théorie dans les années soixante. Cette théorie vise à démontrer que l'énergie totale d'un système composé de *N* électrons en interaction, soumis à un potentiel externe, peut être exprimée comme une fonctionnelle de la densité. De ce fait, il est possible d'obtenir la densité de l'état fondamental en minimisant l'énergie pour n'importe quel potentiel externe ; ainsi, par le biais de connaissances approfondies et grâce à la précision et la puissance.

INTRODUCTION GENERALE

Après cette introduction générale, cette mémoire est organisée comme suit :

- Premier chapitre : présentation générale sur les Heusler
- Deuxième chapitre : rappel sur les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) utilisée par Wien2k [13], la densité du gradient généralisé (GGA) [14], ainsi que le principe de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).
- Troisième chapitre : récapitulation des résultats obtenus lors de nos calculs des propriétés structurales, électroniques et magnétiques et optiques , et finalement une conclusion générale qui résume les principaux résultats de ce travail.

Références bibliographiques

- [1] H. Nowotny, K. Bachmayer, Monatsch. Chem. 81 (1950) 488
- [2] Heusler F, Starck W and Haupt E 1903 Verh. D. DPG 5 220
- [3] Felser C, Fecher G H and Balke B 2007 Angew. Chem. Int. Ed. 46 668–99
- [4] R. Juza, F. Hund, Z. Anorg. Chem. 257 (1) (1948)
- [5] C. Kandpal, C. Felser, R. Seshadri, J. Phys. D 39 (2006) 776.
- [6] P. Villars, L.D. Calvert, Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, second ed., ASM International, Materials Park, OH, 1996.
- [7] H. Mehnane, B. Bekkouche, S. Kacimi, A. Hallouche, M. Djermouni, A. Zaoui, SuperlatticesMicrostruct. 51 (2012) 772–784.
- [8] A. Roy, J.W. Bennett, K.M. Rabe, D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 037602.
- [9] P. Larson et al., Phys. Rev. B 57, 12754 (2000).
- [10] L. Damewood, B. Busmeyer, M. Shaughnessy, C. Y. Fong, L. H. Yang, and C. Felser, Phys. Rev. B 91(2015) 064409
- [11] Pauling L. Phys Rev 54, 899 (1938).
- [12] Kübler J, Fecher GH, Felser C. Private communication
- [13] P. Blaha, K. Schwaz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Juiz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave and Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, edited by K. Schwarz, Vienna University of Technology, Austria ISBN 3-9501031-1-2 (2001).
- [14] J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phy. Lett. 77, 3865 (1996).

CHAPITRE I.

GENERALITES SUR LES

HEUSLER

I.1 Introduction :

L'un des matériaux les plus captivantes remonte à **1903**, lorsque Fritz Heusler a découvert que l'alliage **Cu₂MnAl** se comporte comme un ferromagnétique, malgré le fait que ses composants ne sont pas magnétiques [1,2]. Ce matériau exceptionnel et ses homologues, qui englobent désormais une vaste collection de plus de **1000** composés, sont aujourd'hui désignés sous le nom de composés ou alliages Heusler. Il s'agit de matériaux semi-conducteurs ou métalliques ternaires, soit avec une composition 1 : 1 : 1 (également appelée « **Half-Heusler** »), soit avec une composition stœchiométrique 2 : 1 : 1, connue sous le nom « **Full-Heusler** ».

Ce chapitre présentera également l'équation de Schrödinger et introduira diverses approximations, telles que l'approximation de **Born-Oppenheimer** et celle de **Hartree-Fock**, pour en faciliter la résolution en tenant compte des corrélations électroniques.

Un aperçu des principes de base de la théorie de la fonctionnelle de densité (**DFT**) appliquée par Wien2k [3], et des approximations de Densité Locale (**LDA**, Local Density Approximation) et du Gradient Généralisé (**GGA**) pour définir les fonctionnelles d'échange et corrélation. De manière plus générale, cela permet de simplifier le potentiel cristallin ainsi que l'approche de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (**FP-LAPW**). Nous concluons ce chapitre avec une description concise du code Wien2k (employé dans notre recherche).

I.2 Généralités sur les composés Heusler :

On attribue le nom d'alliages Heusler à une catégorie de composés comprenant environ **3000** composés identifiés. **Fritz Heusler** a découvert ces composés exceptionnels pour la première fois en **1903**, alors qu'il étudiait le ferromagnétisme de l'alliage **Cu₂MnAl** [4]. En raison de leurs diverses caractéristiques, ces composés peuvent se comporter comme des demi-métaux, des semi-conducteurs, des supraconducteurs et bien plus encore.

On les classe en deux catégories en fonction de leur composition chimique : les half-Heusler, caractérisés par une formule chimique **XYZ**, et les full-Heusler, définis par une composition **X₂YZ**. Dans ces formules, **X** et **Y** représentent des métaux de transition tandis que **Z** désigne un élément des groupes **III**, **IV** ou **V**. L'innombrable variété de compositions possibles dans le tableau périodique forme une vaste famille de composés Heusler. (Veuillez-vous référer à la **Figure I.1**)

GENERALITES SUR LES HEUSLER

○ Métaux alcalins ○ Métaux alcalino-terreux ○ Métaux de transition ○ Métaux post-transition

Figure I.1. Les différentes combinaisons des éléments du tableau périodique (alliages Heusler)

I.3 Alliages semi-Heusler (*Half-Heusler*) :

Les alliages de cette catégorie possèdent une composition chimique représentée par XYZ . En 1983, Groot et ses collègues [6] ont mis au jour un alliage demi-Heusler de type $NiMnSb$ [7]. Les semi-Heusler peuvent être décrits comme des composés formés de deux éléments distincts : l'un covalent et l'autre ionique. Par conséquent, les atomes X et Y possèdent un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être perçu comme l'équivalent anionique. L'élément le plus électropositif est positionné en premier dans la formule, pouvant être un élément d'un groupe principal, un métal de transition ou un élément des terres rares. L'élément le plus électronégatif, situé à la fin, est considéré comme appartenant à un élément principal de la seconde moitié du tableau périodique. Par exemple, la classification périodique inclut des cas comme le $LiAlSi$, le $ZrNiSn$ et le $LuAuSn$ [8,9].

I.3.1 Alliages Full-Heusler :

Cette partie présente succinctement les alliages « **full-Heusler** ». Bien que les alliages Heusler ne soient pas le sujet principal de ce travail, nous tenons à les citer pour des raisons de définition.

Ces alliages présentent une composition chimique sous la forme **X₂YZ** et se cristallisent dans un réseau cubique. On trouve trois éléments chimiques distincts qui se disposent sur un réseau cubique comportant quatre sites cristallographiques différents (deux pour **X**, un pour **Y** et un pour **Z**). **X** et **Y** représentent des métaux de transition tandis que **Z** appartient au groupe **III**, **IV** ou **V** dans le tableau périodique. Toutefois, dans certaines situations, **X** et **Y** peuvent être substitués par un composant des terres rares ou par un élément alcalin ou alcalino-terreux.

On suit généralement une convention qui positionne l'élément en double au début de la formule, tandis que l'élément des groupes **III**, **IV** ou **V** du tableau périodique est placé à la fin. Par exemple, **Co₂MnSi** et **Fe₂VAl** [10,11], sauf cas particulier où cet ordre peut être inversé et l'élément le plus électropositif se retrouve en tête, tel que **LiCu₂Sb** et **YPd₂Sb** [12].

I.3.2 Structure cristalline des alliages Half-Heusler :

Plusieurs propriétés de ces alliages dépendent de l'ordre atomique et des quantités de désordre dans la répartition des atomes sur les sites du réseau. Ces quantités de désordre provoquent des changements considérables dans leurs propriétés physiques et chimiques [13]. Les alliages Half-Heusler ont la formule générale XYZ et cristallisent selon une structure cubique non Centro-symétrique (groupe spatial no. 216, F43m), qui est un système ternaire de structure CaF₂ et peut être déduit de la structure tétraédrique de type ZnS en remplissant les sites du réseau octaédrique (**Figure I.2**)

Ce type de structure Half-Heusler peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (**cfc**), dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z [14]. Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4). En principe, trois arrangements atomiques non équivalents sont possibles dans ce type de structure telle que le résume le **Tableau I.1**.

Arrangement	4a	4b	4c
Phase α	X	Y	Z
Phase β	Z	X	Y
Phase γ	Y	Z	X

Tableau I.1. Probabilités d'occupations des sites non-équivalents dans la structure demi-Heusler C1_b

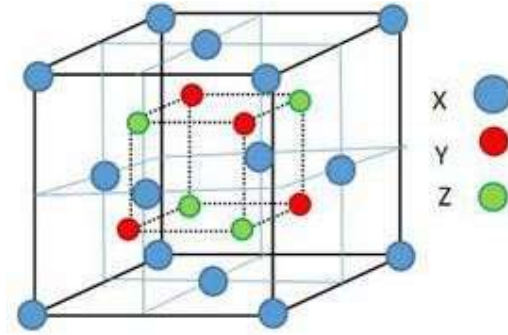


Figure I.2. Structure cristalline des alliages Half-Heusler.

I.4 Composés Demi-Heusler Doubles :

Les composés demi-Heusler doubles (**DHH**) représentent une avancée au-delà des matériaux Heusler ternaires traditionnels, présentant des compositions quaternaires avec des formules telles que $X'X''Y_2Z_2$, $X_2Y'Y''Z_2$, ou $X_2Y_2Z'Z''$. Ces structures sont formées en combinant deux composés demi-Heusler avec des arrangements cristallins distincts, élargissant considérablement l'espace de phase compositionnel disponible pour la découverte de matériaux [15].

Contrairement aux demi-Heusler traditionnels, qui maintiennent généralement une symétrie cubique, certains demi-Heusler doubles comme $\text{ScTaPd}_2\text{Sn}_2$ et $\text{ScTaPt}_2\text{Sn}_2$ cristallisent dans une structure orthorhombique simple avec un groupe d'espace $\text{Pmn}21$ (No. 31). Cette modification structurale résulte du concept de substitution aliovalente, similaire au principe derrière les pérovskites doubles, où le terme "double" signifie la duplication de l'unité de formule.

I.4.1 Propriétés Thermiques et Électroniques :

Une caractéristique remarquable des composés demi-Heusler doubles est leur conductivité thermique de réseau significativement réduite par rapport à leurs homologues ternaires[16]. Cette réduction provient du transport thermique dominé par des modes de phonons à basse fréquence avec des vitesses de groupe plus petites, limitées par la diffusion due au désordre. Par exemple, $\text{Ti}_2\text{FeNiSb}_2$, un composé demi-Heusler double synthétisé, démontre une conductivité thermique de réseau environ trois fois inférieure à celle de TiCoSb à température ambiante.

Les propriétés électroniques des demi-Heusler doubles comme $\text{ScTaPd}_2\text{Sn}_2$ et

ScTaPtSn₂ présentent des bandes interdites indirectes de **0,549 eV** et **0,851 eV** respectivement, les rendant adaptés à diverses applications électroniques. Ces matériaux ont été caractérisés comme des semiconducteurs de type p, avec un potentiel particulier pour les applications thermoélectriques lorsqu'ils sont correctement dopés.

I.5 Composés Demi-Heusler Triples :

Les composés demi-Heusler triples, avec la formule $X_2X''Y_3Z_3$, représentent un autre niveau de complexité dans la famille Heusler [17]. Ces matériaux étendent davantage les possibilités compositionnelles au-delà des demi-Heusler doubles, offrant potentiellement des propriétés et des applications encore plus diverses.

Le concept des demi-Heusler triples suit les mêmes principes qui ont guidé le développement des demi-Heusler doubles, appliquant des stratégies de substitution aliovalente pour créer des structures plus complexes. Bien que moins étudiés que les demi-Heusler doubles, ces matériaux représentent une frontière active dans la recherche sur les matériaux fonctionnels avancés.

I.6 Le composé quaternaire :

Un composé quaternaire de Heusler (QHA) avec la composition $XX'Y'Z$ est créé. La structure prototype de QHA est classée dans le groupe d'espace numéro 216 (F4-3m), avec X, Z et Y' occupant respectivement les positions 4c (1/4, 1/4, 1/4), 4a (0, 0, 0) et 4b (1/2, 1/2, 1/2). Cela donne lieu à un agencement des atomes le long de la diagonale du réseau Heusler sous la forme $XY'-X'-Z$. On a constaté que si le nombre d'électrons de valence décroît en suivant X, X', Y', alors la structure $XX'Y'Z$ offre la plus grande stabilité. Toutefois, si l'on détermine la place de X' en tant que site 4d (3/4, 3/4, 3/4) et qu'on échange les occupations des trois autres sites, deux autres arrangements non équivalents sont envisageables. Normalement, trois configurations atomiques distinctes peuvent exister dans cette structure, comme le récapitule le Tableau I-2. Ces trois types de structures sont illustrés à la Figure I-3.

Position	4a	4b	4c	4d
Type I	Z	Y	X	X'
Type II	Z	X	Y	X'
Type III	X	Y	Z	X'

Tableau I.2. Occupation du site inéquivalentes au sein de la structure d'un Heusler quaternaire $XX'Y'Z$

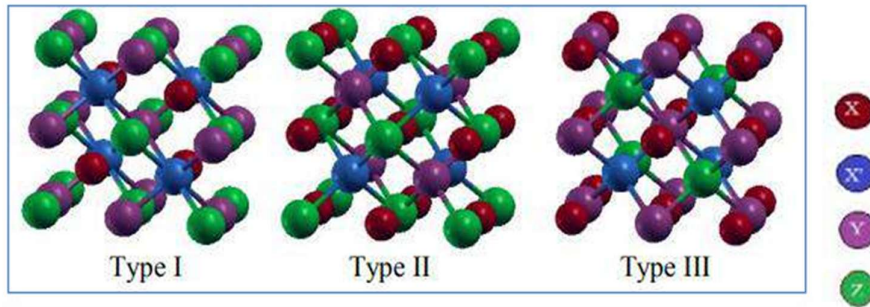


Figure I.3. : Les structures possible d'un Heusler quaternaire $XX'Y'Z$

I.7 Spintronique et ses applications :

La spintronique représente un nouveau domaine de recherche dans le secteur de la nanotechnologie, qui associe trois vecteurs d'information : la charge électrique de l'électron, son spin et le photon. Figure I-4 [18-19]. Ces trois outils illustrent trois aspects distincts de la technologie de l'information et de la communication (TIC) : le traitement des données par le biais du transport d'électrons, le stockage d'information grâce à la manipulation des spins, et finalement la transmission de données à travers les connexions optiques.

Les progrès récents dans le secteur des TIC requièrent une vaste capacité de stockage d'informations et une grande vitesse de traitement des données. Ces deux performances ont connu une hausse de 30 % par an en ce qui concerne le stockage d'informations et de 100 % sur une période de 18 mois pour les processeurs basés sur le silicium, illustrant ainsi la loi de Moore. L'annonce de l'atteinte potentielle de limites découle de l'association des mémoires basées sur des matériaux ferromagnétiques et de l'électronique des semi-conducteurs, également connue sous le nom de magnéto-électronique, ou encore, en d'autres termes, le transport d'électrons à spin polarisé [20].

L'innovation majeure dans ce secteur a été la découverte de la magnétorésistance géante (GMR), mise en évidence dans des multicouches métalliques grâce au transport dépendant du spin électronique. L'effet GMR a déjà été utilisé pratiquement dans les têtes de lecture des disques durs (HDD). La découverte de l'effet de la magnétorésistance tunnel (TMR) a également constitué une avancée majeure. On a découvert plus tôt que l'effet de GMR, mais cette découverte n'a été réalisée à température ambiante que récemment [21-22]. L'avenir des TIC nécessitera un transfert de données à haut débit via la fibre optique. Une large portion de ce transfert instantané d'informations est attribuée à la diode laser, qui est principalement dépendante de l'efficacité de cet isolant optique. Ce matériau isolant est composé d'un semi-

GENERALITES SUR LES HEUSLER

conducteur magnétique dilué DMS, qui représente le premier DMS utilisé dans les phénomènes magnéto-optiques.

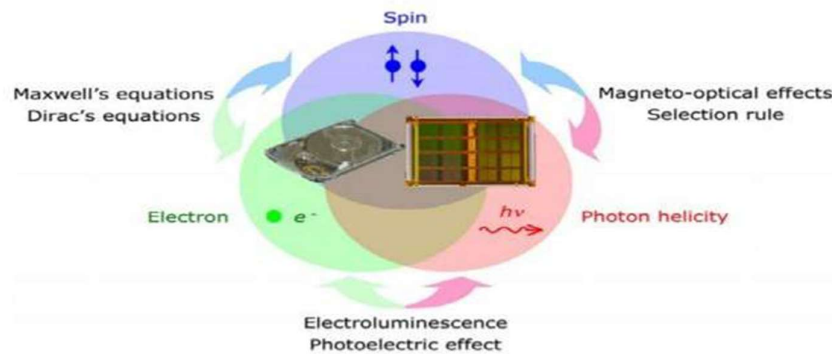


Figure I.4 : Concept d'applications des composants spintronique

I.8 Conclusion :

Les composés de Heusler sont une classe remarquable de matériaux qui ont considérablement avancé notre compréhension des systèmes intermétalliques et leurs applications variées. Depuis leur découverte initiale en 1903 jusqu'à leur rôle actuel dans les technologies de pointe, ces composés ont démontré une exceptionnelle polyvalence, adaptabilité et fonctionnalité.

Références bibliographiques

- [1] C. M. Fang, Journal of Applied Physics, vol. 91, no 10, mai 2002, p. 8340-8344 .
- [2] J. M. D. Coey et M. Venkatesan, « Half-metallic ferromagnetism: Example of CrO₂ (invited) », Journal of Applied Physics, vol. 91, no 10, mai 2002, p. 8345-8350
- [3] M. Fonin, R. Pentcheva, Yu. S. Dedkov, M. Sperlich, D. V. Vyalikh, M. Scheffler, U. Rüdiger et G. Güntherodt, « Surface electronic structure of the Fe₃O₄ (100): Evidence of a half-metal to metal transition », Physical Review B,, vol. 72, no 10, septembre 2009, article no 104436
- [4] Y. Ji, C. L. Chien, Y. Tomioka et Y. Tokura, « Measurement of spin polarization of single crystals of La_{0,7}Sr_{0,3}MnO₃ and La_{0,6}Sr_{0,4}MnO₃ », Physical Review B, vol. 66, no 1, juillet 2002, article no 012410 .
- [5] Chikazumi 2009, p. 118 .
- [6] Ferromagnétique, sur futura-sciences.com, Futura-Sciences (consulté le 18 septembre 2015).
- [7] Heusler F, « Über magnetische Manganlegierungen », Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, vol. 5, 1903, p. 219
- [8] Knowlton A.A. et Clifford O.C., « The Heusler alloys », Trans. Faraday So, vol. 8, 1912, p. 195–206.
- [9] Richard M et Bozorth, Ferromagnetism, Wiley-VCH, 1993, p 201.
- [10] Bouchard M., thèse de doctorat, Imperial College London, 1970
- [11] U Hartmann (ed) 2000 Magnetic Multilayers and Giant Magnetoresistance (Berlin: Springer).
- [12] A Yamaguchi, T Ono, S Nasu, K Miyake, K Mibu and T Shinjo 2004 Phys. Rev. Lett. 92 077205.
- [13] M Jullière 1975 Phys. Lett. A 54 225.
- [14] C Chappert, A Fert and F N van Dau 2007 Nature Mater. 6 813.
- [15] Double Half-Heuslers," SSRN, 38 Pages, Published February 22, 2019
- [16] Recent Advances in Thermoelectric Performance of Half-Heusler Compounds," Metals, 2018, 8(12), 989, Published November 24, 2018
- [17] Alloyed triple half-Heuslers: a route toward high-performance thermoelectrics with intrinsically low lattice thermal conductivity," Royal Society of Chemistry, Published April 25, 2023
- [18] P.J Webster, J Phys Chem Solids 32 (1971) 1221
- [19] M.Ziese and M. J. Thornton (ed) 2001 Spin Electronics (Berlin: Springer)

[20] G A Prinz 1998 Science 282 1660.

[21] P Gronberg, R Schreiber, Y Pang, M D Brodsky and H Sowers 1986 Phys.

[22] N F Mott 1935 Proc. Phys. Soc. 47 571.

CHAPITRE II.

LES

METHODES DE CALCUL

II.1. THEORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITE (DFT) :

Dans le domaine de la science des matériaux, un solide est défini comme un regroupement d'atomes, composés de noyaux chargés positivement, considérés comme des particules massives, et d'électrons chargés négativement, qui sont considérés comme des particules moins massives. La question centrale en physique des solides est de saisir la disposition de ces particules qui détermine leurs caractéristiques. La quasi-totalité des propriétés des matériaux peut être examinée à l'aide d'instruments de calcul appropriés pour aborder cette problématique spécifique de la mécanique quantique.

On peut formuler le problème général en termes de l'équation du mouvement pour chaque particule constituant le système, en se basant sur la résolution de l'équation de Schrödinger.

II.2. L'équation de Schrödinger :

On peut envisager tout cristal comme un système distinct formé d'un nombre colossal de particules en interaction. La mécanique quantique, dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, permet d'obtenir les caractéristiques physiques de ce système.

En 1925 le physicien autrichien Erwin Schrödinger [1] proposa une équation très importante dans la mécanique quantique pour étudier les systèmes quantiques, qui s'écrit sous la forme :

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

Avec H est l'hamiltonien du cristal qui contient tous les termes d'énergie (énergie Cinétique et potentielle), aussi bien ceux apportés par les noyaux que ceux apportés par les électrons. E est l'énergie totale du système et Ψ c'est la fonction d'onde, elle contient toute l'information du système.

D'où on peut écrire L'hamiltonien de tout le système sous la forme suivante :

$$H = T_e + T_n + V_{e-n} + V_{e-e} + V_{n-n} \quad (\text{II.2})$$

Dans laquelle les termes T_e , T_n , V_{e-n} , V_{e-e} et V_{n-n} correspondent respectivement :

$$T_e = - \sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad \text{l'énergie cinétique des électrons.}$$

$$T_N = - \sum_I^N \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 \quad \text{est l'énergie cinétique des noyaux.}$$

$$V_{e-n} = \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} \quad \text{est l'énergie potentielle de l'interaction (électrons - noyaux).}$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{est l'énergie potentielle de l'interaction (électrons - électrons).}$$

$$V_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad \text{est l'énergie potentielle de l'interaction (noyaux - noyaux)}$$

Les trois derniers éléments se réfèrent respectivement aux interactions électrostatiques entre les électrons et les noyaux, les électrons entre eux ainsi que les noyaux entre eux. Par ailleurs, il faut considérer les électrons comme des fermions. Selon le principe de Pauli, la fonction d'onde doit présenter une antisymétrie lors de l'échange de deux fermions.

Pour déterminer l'énergie et la fonction d'onde du système, il est nécessaire de résoudre cette équation multidimensionnelle, un défi connu dans le domaine de la physique théorique sous l'appellation « **problème à N corps** ». Ce problème est extrêmement complexe même pour des systèmes comprenant une faible quantité de particules.

L'Hamiltonien du système est complexe, ce qui rend la détermination de l'énergie E difficile. Il est nécessaire de rendre le terme H plus simple.

II.3. Approximation de Born-Oppenheimer (1927) :

Comme les noyaux sont considérablement plus massifs que les électrons, selon Born et Oppenheimer [2], on peut faire abstraction de leurs mouvements comparativement à ceux des électrons, se concentrant uniquement sur le mouvement des électrons dans le cadre rigide du réseau périodique des potentiels nucléaires. Ainsi, on omet l'énergie cinétique T_N des noyaux et l'énergie potentielle V_{N-N} se transforme en une constante que nous pouvons sélectionner comme nouvelle référence pour les énergies.

La fonction d'onde totale du système s'écrit donc :

$$H_e = T_e + V_{N-e} + V_{e-e} \quad (\text{II.3})$$

On a donc réduit la complexité du problème. Mais la solution de l'équation (II.1) reste

toujours difficile. Il faut faire d'autres approximations pour résoudre ce problème.

II.4. Approximation de Hartree-Fock (1930) :

En 1930, Fock [3] a démontré que les solutions de l'hamiltonien enfreignent le principe d'exclusion de Pauli, car elles ne présentent pas d'antisymétrie lors de l'échange de deux électrons quelconques. L'antisymétrisation de la fonction d'onde électronique se formule, par exemple, en permutant deux électrons :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2) \dots \psi(\vec{r}_N) \quad (\text{II.4})$$

Donc, une telle description suit le **principe d'exclusion de Pauli** qui stipule que deux électrons ayant les mêmes nombres quantiques ne peuvent pas se trouver dans le même état quantique en même temps, et également à l'indiscernabilité des électrons. Dans la formulation de Hartree concernant la fonction d'onde, ce n'est pas le cas, puisque chaque électron i occupe exactement l'état i . Hartree et Fock ont élargi cette idée en démontrant que le principe de Pauli est observé si l'on présente la fonction d'onde sous la forme d'un « **déterminant de Slater** ». La fonction Φ mène aux équations de Hartree-Fock pour un système à une particule

$$\begin{aligned} &\text{La résolution des équations de Hartree-Fock peut être complexe lorsqu'il y a } \quad (\text{II.5}) \\ &(-\frac{1}{2}\Delta_i + V_{ext}(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{Ne} \int d^3r' \frac{|\varphi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \varphi_i(\vec{r}) - \sum_{j=1}^{Ne} \delta_{\sigma_i\sigma_j} \int d^3r' \frac{\varphi_j^*(\vec{r}')\varphi_i(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \varphi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \end{aligned}$$

un grand nombre d'électrons dans le système analysé. Les échanges entre électrons entraînent des ajouts d'énergie en plus de ceux prévus par l'approximation de Hartree-Fock (AHF), que l'on désigne comme termes d'énergie de corrélation selon Wigner [4]. Un ensemble de techniques, appelées interaction de configurations (CI, Configuration Interaction), a été élaboré sur cette fondation. Ils visent à parvenir à une résolution précise de l'équation de Schrödinger. Hélas, l'explosion du nombre de configurations en fonction du nombre d'électrons impliqués restreint la capacité des calculs à de très petits systèmes. En théorie, l'AHF pose une difficulté en raison de la nature non locale du potentiel d'échange. Cette méthode ne tient pas compte des effets de corrélation entre électrons de spins antiparallèles.

II.5. Théorie de Fonctionnelle de Densité (DFT) :

Comme le suggère son appellation, il s'agit d'une théorie qui se sert de la densité électronique comme fonction essentielle, contrairement à la fonction d'onde utilisée dans les méthodes de Hartree [5] et Hartree-Fock [6].

En réalité, l'idée d'exploiter la densité électronique découle des recherches de Thomas et Fermi. Ils ont tenté de formuler l'énergie totale d'un système en fonction de sa densité

électronique en exprimant son énergie cinétique à travers une fonctionnelle de cette mesure toutefois, la précision obtenue était inférieure à celle de **Hartree-Fock** en raison de l'absence du terme d'échange-corrélation.

Dirac a perfectionné cette théorie en intégrant au modèle de Thomas et Fermi une énergie d'échange qui dépend de la densité électronique. Cependant, l'expression de la fonctionnelle de la densité électronique. Mais le terme de corrélation électronique était toujours absent dans cette nouvelle approche.

II.5.1. Théorème de Hohenberg et Kohn :

Hohenberg et Kohn ont démontré qu'un potentiel extérieur V_{ext} pour un système de particules en interaction est une fonctionnelle singulière de la densité électronique (ρ) [7].

- Le premier théorème (principe de variation) : On dispose d'une fonction universelle $E[\rho(\mathbf{r})]$ qui exprime l'énergie totale en fonction de la densité électronique (ρ), applicable à tout potentiel externe $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$.
- La valeur qui minimise cette fonctionnelle correspond à l'énergie de l'état fondamental du système, et la densité $\rho_0(\mathbf{r})$ associée représente la densité précise de l'état fondamental.

Ainsi, l'énergie globale du système, qui est une fonction de la densité électronique, se présente sous cette forme [7] :

$$E[\rho] = T[\rho] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}' + E_{xc}[\rho] \quad (\text{II.6})$$

Les théorèmes de Hohenberg-Kohn n'ont pas une grande valeur pratique. Ils déclarent fondamentalement qu'une fonctionnelle exacte de la densité existe cependant ils ne disent rien au sujet de la façon de l'obtenir. Dans cette expression les formules de l'énergie cinétique et d'échange-corrélation restent toujours inconnues. Puisque la contribution du premier terme à l'énergie totale est importante il ne peut pas être exprimé par une expression approximative contrairement au terme E_{xc} .

II.5.2. Méthode de Kohn et Sham :

Selon Kohn et Sham [8], la densité électronique est exprimée comme la somme des densités des particules libres. Ils ont recours au principe variationnel pour déterminer l'énergie

de l'état fondamental et la densité, fournissant ainsi la fonctionnelle $E_{xc}[\rho]$.

Ainsi, l'expression de la fonctionnelle d'énergie $E_{vext}[\rho]$ se présente comme suit :

$$E_{vext}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{XC}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad (\text{II.7})$$

Où :

- T_0 : est l'opérateur de l'énergie cinétique du système sans interaction.
- V_H : désigne l'opérateur du potentiel de Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons).
- V_{XC} : Le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation.
- V_{ext} : inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

Dans la description des états d'électrons libres, les notions de Hartree et d'énergie cinétique sont primordiales. L'énergie d'échange et corrélation $E_{xc}[\rho]$ tient compte de la différence entre l'énergie cinétique réelle et celle des électrons non interactifs.

Ainsi que de la différence entre l'énergie d'interaction réelle et celle de Hartree. On formule alors l'équation de Schrödinger comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + \int \frac{d^3r_j}{|r_i - r_j|} \rho(r_j) + V_{ext}r \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (\text{II.8})$$

Où le potentiel d'échange et corrélation est donné par la fonctionnelle dérivée :

$$V_{XC}(r) = \frac{\partial E_{XC}[\rho]}{\partial \rho(r)} \quad (\text{II.9})$$

Et la densité de l'état fondamental est donnée par une somme sur l'ensemble des orbitales occupées :

$$\rho(r) = \sum_{occup} |\varphi_i(r)|^2 \quad (\text{II.10})$$

Il s'agit donc de résoudre de manière auto-cohérente l'ensemble des équations (II.8), connues sous le nom d'équations de Kohn et Sham, afin de déterminer l'état fondamental du système. L'addition des trois termes $V_H + V_{XC} + V_{ext}$ représente un potentiel effectif V_{eff} :

$$V_{eff}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{XC} + V_{ext} \quad (II.11)$$

Cette méthode est formellement exacte, mais pour le calcul pratique de l'énergie d'échange et corrélation, qui est une fonctionnelle de la densité, nécessite l'introduction de certaines approximations.

La méthode de Kohn et Sham conserve sa précision dans sa formulation, puisque tous les éléments énergétiques et leurs potentiels associés peuvent être calculés, à l'exception de celui lié à l'échange-corrélation qui n'est pas précisément déterminé bien qu'il soit considéré comme un terme correctif. Plus l'information sur le dernier sera exacte, plus la densité sera calculée précisément, et donc plus l'énergie déterminée sera proche de l'énergie réelle. Par conséquent, l'approche de la fonction d'échange et de corrélation doit être effectuée de manière à offrir une représentation aussi exacte que possible du système. Dans toutes les situations, il est essentiel d'utiliser différentes approximations que nous allons détailler ici. Ces équations, en raison de leur interdépendance, doivent être résolues de manière auto-cohérente, c'est-à-dire grâce à un processus itératif basé sur une densité initiale comme illustré

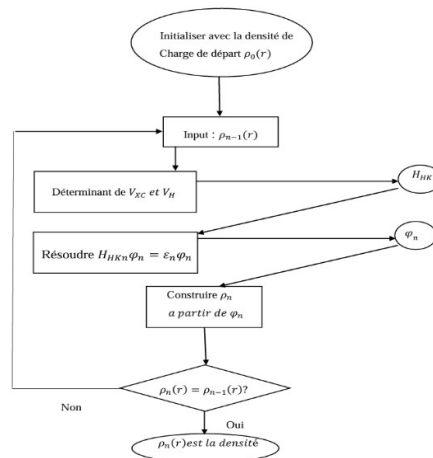


Figure II.1 : Processus de la n^{ième} itération dans le cycle auto-cohérent des équations de Kohn et Sham.

II.5.3. Approximation de la densité locale (LDA) :

En général, la **DFT** offre une représentation fiable des caractéristiques d'état fondamental. Ses applications pratiques reposent sur des approximations du potentiel d'échange-corrélation qui explique les impacts du principe de Pauli et du potentiel de Coulomb, au-delà d'une interaction électrostatique strictement pure entre les électrons.

La connaissance exacte du potentiel d'échange corrélation signifie que nous avons résolu exactement le problème de multi-corps. Parmi les approximations les plus utilisées actuellement est l'approximation locale de densité (**LDA**) qui substitue localement la densité d'énergie d'échange corrélation d'un système non homogène par celle d'un gaz d'électrons de même densité [9].

Depuis 1965, Kohn et Sham suggèrent l'approximation de la densité locale (LDA) [10] pour approcher la fonctionnelle de la densité $E_{xc}[\rho(r)]$, permettant ainsi de traiter un système inhomogène.

Comme étant localement uniforme, disposant d'une énergie d'échange et de corrélation précisément définie :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(r)] dr^3 \quad (II.12)$$

Où $\varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(r)]$ est l'énergie d'échange et de corrélation par particule d'un gaz électronique uniforme de densité que l'on connaît sa forme :

$$V_{xc}^{LDA}(r) = \frac{\partial E_{xc}^{LDA}[\rho(r)]}{\partial \rho(r)} = \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(r)] + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{xc}^{hom}[\rho(r)]}{\partial \rho(r)} \quad (II.13)$$

Pour les matériaux magnétiques, le spin des électrons offre une liberté supplémentaire. Dans ce contexte, il est nécessaire d'élargir la **LDA** à l'Approximation de Densité de Spin Locale (**LSDA : Local Spin Density Approximation**), où l'énergie d'échange et de corrélation E_{xc} se transforme en une fonctionnelle dépendant des deux densités de spin, hautes et basses :

$$E_{xc}^{LSDA}[\rho \uparrow, \rho \downarrow] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)] dr^3 \quad (II.14)$$

II.5.4. Approximation du Gradient Généralisé (GGA) :

Dans la LDA, on utilise l'information de la densité au point r , cependant dans un système réel, cette densité présente une inhomogénéité spatiale. Il serait donc plus approprié d'insérer un correctif à cette fonctionnelle qui prendrait en compte le taux de changement de $n(r)$. L'idée qui a donné naissance à la majorité des ajustements de la LDA utilisés actuellement est celle de prendre en considération les fluctuations locales de la densité $n(r)$ par le biais de son gradient $\vec{\nabla}n(r)$.

C'est l'approximation du gradient généralisé **GGA** (Generalised Gradient Approximation). De telles fonctionnelles ont la forme générale donnée par l'équation [11] :

$$E_{XC}^{GGA}[n(r)] = \int d^3r \varepsilon(n(r), \vec{\nabla}n(r)) \quad (II.15)$$

Les diverses **GGA** qui existent se distinguent les unes des autres par la sélection de la fonctionnelle $(\varepsilon(n(r), \vec{\nabla}n(r)))$. La version la plus couramment utilisée de GGA est celle suggérée par Perdew Burke et Ernzerhof en 1996 [11].

Pour conclure cette section, nous pouvons affirmer que la théorie de la fonctionnelle de la densité constitue un instrument fort utile pour l'analyse des systèmes d'électrons interagissant. Effectivement, elle réduit le problème d'interaction entre N corps à celui de N corps indépendants évoluant dans un potentiel effectif. L'instauration de ce système de particules indépendantes a rendu possible de considérer la majorité de l'énergie cinétique. L'énergie négligée est due au fait que la fonction d'onde globale du système n'est pas identique au déterminant de Slater (sinon, la théorie de Hartree-Fock serait précise). Il faut fournir un effort supplémentaire pour obtenir une description précise de l'énergie cinétique, car plutôt que de résoudre une seule équation liée à la densité, il est nécessaire d'en résoudre plusieurs (N).

II.6. Méthode de calcul :

II.6.1. Introduction :

Au cours des dernières années, diverses techniques pour évaluer les caractéristiques structurales et électroniques des matériaux telles que le paramètre de réseau, le module de compressibilité, les structures de bandes, l'énergie de cohésion, la densité de charge, entre autres, ont été mises en œuvre.

- Parmi ces approches, les méthodes ab-initio qui ne nécessitent que des données de base pour effectuer les calculs

La méthode des ondes planes augmentées (APW) a été développée par Slater en 1937

[12]. Suite à plusieurs modifications apportées par Anderson [13], cette technique est devenue la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW). Approximation).

❖ Avant de se lancer dans cette nouvelle approche, on commence par présenter la méthode (APW) et les raisons qui ont conduit à son élaboration (FP-LAPW).

II.6.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

Dans son article [14], Slater présente la méthode APW (onde plane augmentée). À proximité d'un noyau atomique, le potentiel et les fonctions d'onde prennent la forme « Muffin-Tin » (MT), qui présente une symétrie sphérique à l'intérieur de la sphère MT de rayon R_a . En revanche, entre les atomes, on peut considérer que le potentiel et les fonctions d'onde sont lisses.

En conséquence, les fonctions d'onde du cristal sont développées dans des bases différentes selon la région considérée : Solutions radiales de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère MT et ondes planes dans la région interstitielle (Figure II.2).

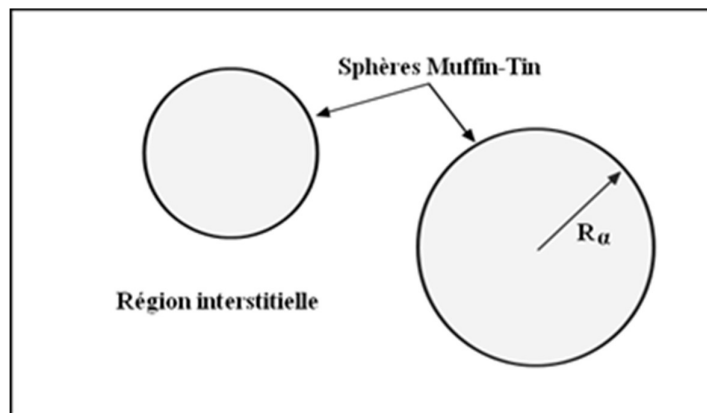


Figure II.2 : Potentiel «Muffin-Tin».

Alors la fonction d'onde $\Phi(r)$ est de la forme :

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_a \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < R_a \end{cases} \quad (\text{II.16})$$

Ici, R_a désigne le rayon de la sphère MT, Ω correspond au volume de la cellule et CG ainsi que Alm font référence aux coefficients du développement en harmoniques sphériques Alm . La fonction $U_l(r)$ constitue une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la

composante radiale, qui se présente sous la forme :

$$\left\{ \frac{-d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r u_l(r) = 0 \quad (\text{II.17})$$

Où $V(r)$ représente le potentiel muffin-tin et El l'énergie de linéarisation. Les fonctions radiales définies par (II.16) sont orthogonales à tout état propre du cœur. Cette orthogonalité disparaît en limite de la sphère [15] comme le montre l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_1 - E_2) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 U_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 U_2}{dr^2} \quad (\text{II.18})$$

Les Coefficients Alm doivent être développés en fonction du CG coefficient des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi après les calculs :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} U_l(R_a)} \sum_G C_G J_l(|k + g|) R_a Y_{lm}^*(k + g) \quad (\text{II.19})$$

Le centre de la sphère est considéré comme l'origine ; les coefficients Alm sont dérivés des coefficients CG ; dans cette approche, les paramètres El servent d'éléments variationnels. Les fonctions individuelles, marquées par l'indice G , sont donc ajustées à des fonctions radiales dans les sphères MT et correspondent en conséquence à des ondes planes augmentées (Augmented Plane Waves).

Ce cadre théorique offre une représentation assez adéquate pour les matériaux présentant

une structure cubique à faces centrées, et devient progressivement moins satisfaisant lorsque la symétrie et la coordination de la composition du matériau décroissent. De plus, les fonctions APW constituent des solutions de l'équation de Schrödinger, mais uniquement pour l'énergie El . Ils manquent d'une certaine souplesse pour refléter les changements de la fonction d'onde lorsque la bande d'énergie s'écarte de cette valeur référentielle. Par conséquent, l'énergie El doit correspondre à celle de la bande d'énergie portant l'indice G .

Cela implique que pour un point $\mathbf{k}$ spécifique, il n'est pas possible d'obtenir les bandes d'énergie simplement par diagonalisation et qu'il est indispensable de considérer le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

Suite à certaines contraintes de la technique APW, d'autres approches pour le calcul de la structure électronique (issues de la méthode APW) ont vu le jour, en particulier les méthodes LAPW, LAPW+lo et APW+lo [16.17.18].

II.6.3. Principe de la méthode LAPW :

Dans la technique des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : Linearized Augmented Plane Wave), les fonctions fondamentales à l'intérieur de la sphère Muffin-Tin (MT) constituent une superposition linéaire des fonctions radiales et de leurs dérivées en fonction de l'énergie.

Les fonctions sont définies comme dans la méthode APW (II.16), mais l'énergie El est fixe et les fonctions doivent satisfaire la condition suivante :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dU_l}{dr} \right] + \left[\varepsilon - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) \right] U_l(\varepsilon, r) = 0 \quad (\text{II.20})$$

Tandis que leurs dérivées satisfont l'équation suivante :

$$\left\{ \frac{-d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = r U_l(r) \quad (\text{II.21})$$

Les coefficients B_{lm} correspondent à la fonction U_l et ils partagent la même nature que A_{lm} . Les méthodes LAPW constituent une référence solide qui, avec un unique El , permet d'obtenir

l'ensemble des bandes de valence sur une vaste gamme d'énergie. Quand ce n'est pas faisable, il est souvent possible de segmenter la fenêtre énergétique en deux segments, ce qui constitue une simplification considérable par rapport à la technique APW. Normalement, si U_l est nul à la surface de la sphère, alors sa dérivée U_l ne sera pas nulle. Ainsi, la question de continuité à la surface de la sphère MT ne se posera pas dans l'approche LAPW.

II.6.4. La méthode de l'onde plane augmentée linéarisées (FPLAPW) :

En 1937, Slater [19] a développé la méthode de l'onde plane augmentée (APW). Après plusieurs modifications faites par Anderson [20]. Cette méthode devienne la méthode des ondes planes augmentées linéairement (FP-LAPW).

Slater propose l'approximation du potentiel Muffin-tin pour dépeindre le potentiel cristallin. D'après cette estimation, le potentiel est sphériquement symétrique à l'intérieur des sphères atomiques du rayon $[U(r) = U(|r|)]$ et supposé constant à l'extérieur $[U(r) = U_0]$. Pour une simplification accrue, on peut sélectionner l'énergie initiale de sorte que U_0 soit nulle $[U_0=0]$.

Donc, le potentiel s'écrit sous la forme :

$$U(r) = \begin{cases} U(r) & \text{pour } r \leq r_0 \\ 0 & \text{pour } r > r_0 \end{cases} \quad (\text{II.22})$$

❖ Avec $r = |r|$

Avant d'entamer cette nouvelle méthode, en commençant tout d'abord par décrire la méthode (APW) et les motivations derrière le développement de la méthode (FPLAPW).

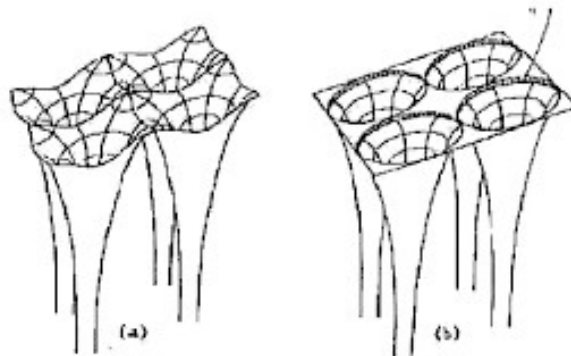


Figure II.3 : potentiel cristallin d'un réseau carré à deux dimensions : (a) potentiel totale, et (b) potentiel muffin-tin.

II.6.5. Le concept de la méthode FP-LAPW :

La méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées à Potentiel Total (FP-LAPW) [21] ne repose sur aucune approximation en ce qui concerne la structure du potentiel ou de la densité de charge. Ils sont plutôt élaborés en tant qu'harmoniques, du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, ainsi que des séries de Fourier dans les zones interstitielles.

Ce qui est à l'origine du nom « **Full-Potential** ». Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT et le développe sous la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} \sum_K V_K e^{iKr} & r > R_a \\ \sum_{lm} V_{lm} Y_{lm}(r) & r < R_a \end{cases} \quad (\text{II.23})$$

De la même manière, la densité de charge est développée sous la forme :

$$\phi(r) = \begin{cases} \sum_k V \rho_K e^{iKr} & r > R_a \\ \sum_{lm} V \rho_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_a \end{cases} \quad (\text{II.24})$$

II.7. Le code Wien2k :

Une application réussie de la méthode FP-LAPW est le programme Wien, un code développé par Blaha, Schwartz et Luitz [22]. Il a été appliqué avec succès pour le gradient du champ électrique [23], les systèmes supraconducteurs à haute température, les minéraux, les surfaces des métaux de transition, les oxydes non ferromagnétiques et même les molécules.

Wien2k [24-25] consiste en différents programmes indépendants qui sont liés par le CSHELSCRIPT. L'usage des différents programmes est présenté dans la **figure II.4** Les principe aux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-cohérent sont :

- **NN** : C'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, qui

LES METHODES DE CALCUL

aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

- **LSTART** : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.
- **SYMMETRY** : Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.
- **KGEN** : Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.
- **DSTART** : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Alors un cycle self consistant est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifiée.

Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : Calcul les densités de valence.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : Mélange la densité d'entrée et de sortie.

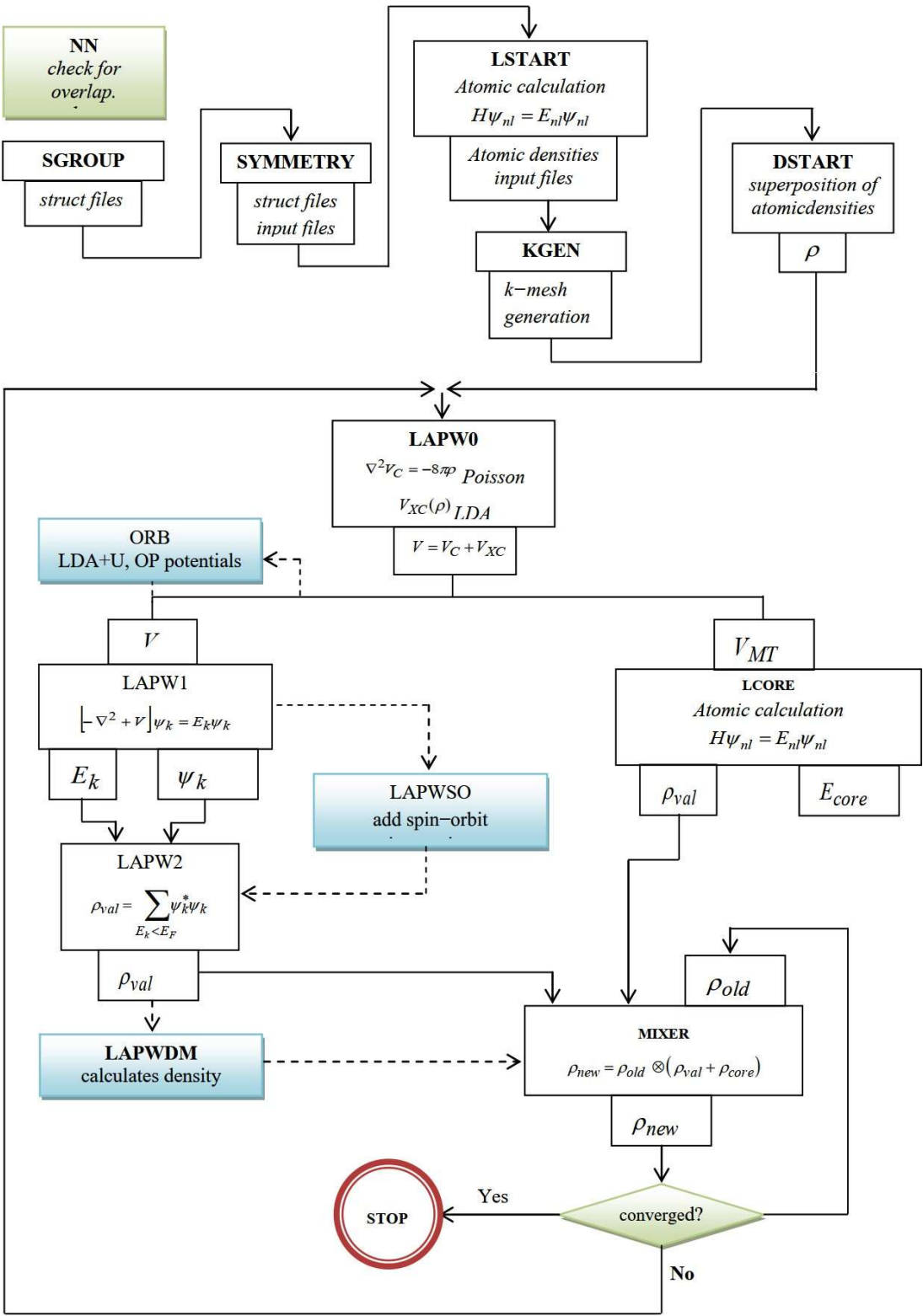


Figure II.4 : Structure du code Wien2k. [25].

II.8. Conclusion :

Dans Ce chapitre nous avons montré que l'équation de Schrödinger générale c'est à-dire sous sa forme initiale et sans aucune simplification demeure difficile à résoudre lorsqu'il s'agit d'un cristal (problème à N corps en interaction). Nous avons également montré que les approximations de Born-Oppenheimer et celle de Hartree-Fock ne suffissent pas non plus pour résoudre ce problème. En revanche, la DFT et dans le cadre de la méthode **FP-LAPW** semble apporté des réponses satisfaisantes au problème de N corp. Les approximations **LDA** et **GGA** employée dans le cadre de la DFT sont bien nécessaire pour compléter cette dernière. En fin nous avons vu qu'il existe bien un code informatique appelé **Wien2k** qui reprend point pour point tout ce formalisme mathématique et il est prêt à être appliqué à l'étude des matériaux.

Références bibliographiques

- [1] Schrodinger E, Quantisierung, Ann. D. Physik 79 (1926) 361-376.
- [2] C.J.Cramer, "Essentials of Computational "Chemistry Theories and Models (England: John Wiley & Sons Ltd, 2004).
- [3] V.A. Fock, Z. Phys., 15, 126 (1930).
- [4] E.P. Wigner, Trans. Faraday Soc., 34, 678 (1938).
- [5] Hohenberg P and Kohn W, Phys. Rev. 136 (1964) 864-871
- [6] Cottenier S, "Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by- step introduction" (K.U. Leuven, Belgium, (2002)), ISBN: 90-807215-1-4.
- [7] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev.136. 864 (1964).
- [8] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
- [9] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865.
- [10] L. J. Sham, W. Kohn, Phys. Rev 145. 561 (1966).
- [11] M. Ferhat, B. Bouhafs, A. Zaoui et al, J. Phys. : condens-Matter. 10. 7995 (1995).
- [12] Singh D, Phys. Rev. B 43 (1991) 6388.
- [13] David J. Singh, "Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method", (1994), ISBN: 978-1-4757-2314-4.
- [14] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- [15] O. K. Andersen, Phys. Rev. B 12, 3060 (1975).
- [16] D. J. Singh and L. Nordström, Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method, Second Edition, Springer (2006).
- [17] S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a step bystep introduction (Instituutvoor Kern- en Stralingsfysica, K.U.Leuven, Belgium), 2002, ISBN 90-807215-1-4 (to be found at [Http: //www.wien2k.at/reg user/textbooks](http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks)).
- [18] [http: //www.wien2k.at/lapw/](http://www.wien2k.at/lapw/).
- [19] O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12, 3060 (1975).
- [20] J.C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
- [21] D. R Hamann, Phys. Rev. Lett. 212, 662 (1979).
- [22] K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, Phys. Rev. B 42, 2051 (1990).
- [23] B. Winkler, P. Blaha and K. Schwarz, Am. Mineralogist 81, 545 (1996).
- [24] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k, an Augmented Plane, Wavep

Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, 2001.

[25] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, WIEN97. Technical University, Vienna,(1997).

CHAPITRE III. RESULTATS ET DISCUSSION

III.1. Introduction :

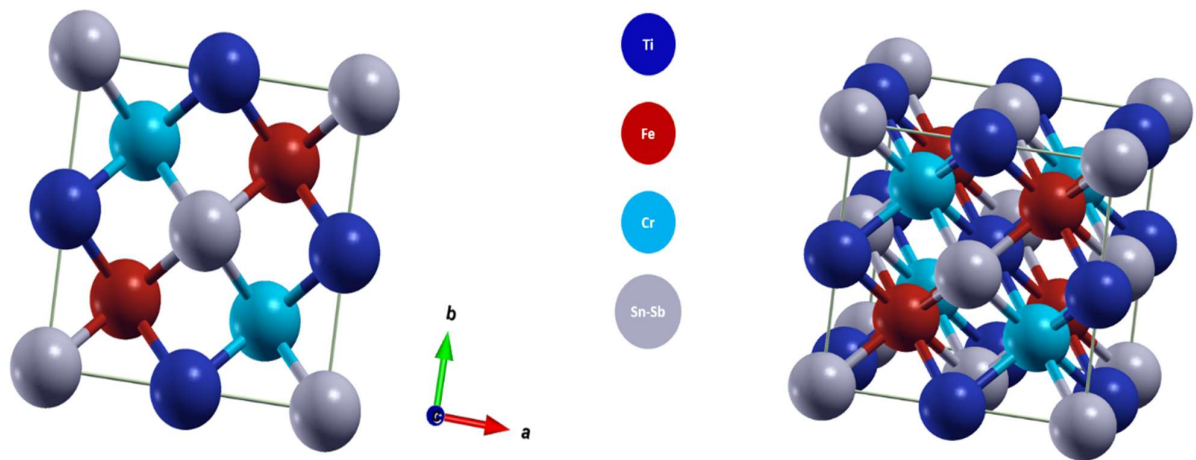
Dans ce chapitre, nous avons calculé les propriétés structurales, magnétiques, électroniques de **FeCrTiX** (X : Sn, Sb). Nous avons utilisé dans notre étude les calculs des premiers principes de la théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**) [1] et la méthode des ondes planes linéairement augmentées (**FP-LAPW**) [2] introduite dans le code **WIEN2K** [3].

Dans les conditions ambiantes, ce composé se cristallise dans la structure cubique avec un groupe spatial (**F-43m**). En fonction de ces données, nous allons débiter ce chapitre par une partie optimisation des paramètres numériques relatifs à la méthode de calcul. Ces paramètres sont l'énergie de coupure et qui est contrôlée par le paramètre **R_{MT}×K_{MAX}** et le maillage dans la zone de Brillouin contrôlé par le paramètre k-point.

Selon les paramètres optimisés, nous étudierons ce composé et interpréterons les résultats obtenus à travers des graphiques et des tableaux.

III.2. Détails de calcul :

Nous avons examiné les caractéristiques structurales, électroniques et magnétiques des alliages half Heusler qui se cristallisent habituellement dans la structure (F-43m, groupe d'espace N⁰216). Ils possèdent une structure qui n'est pas centrée sur la symétrie, décrite par une formule générale. XYZ, ou encore X et Y sont des métaux de transition, tandis que Z désigne un élément non magnétique appartenant au groupe III, IV ou V du tableau périodique.



Figures III.1. : Structure cristalline de composé FeCrTiX

RESULTAT ET DISCUSSION

La structure half Heusler est caractérisée par l'interpénétration de trois sous réseaux cubique à faces centrées (cfc) [4]. En principe, trois arrangements atomiques non équivalents (type I, type II et type III) notés aussi α , β , γ sont possibles dans ce type de structure.

Tableau III.1. Energie no magnétique et magnétique de les types Heusler

Type	Energie No magnétiques	Energie Magnétiques
I	-18713.289764	-18713.311763
II	-18713.205352	-18713.234877
III	-18713.227801	-18713.256721

Les rayons de la sphère "muffin-tin" (R_{MT}) sont choisis automatiquement par le code Wien2k à partir de la configuration atomique proposée comme indiqué dans le tableau suivant :

R_{MT}				
FeCrTiSn	Fe= 2.45	Cr= 2.45	Ti= 2.45	Sn= 2.50
FeCrTiSb	Fe= 2.36	Cr= 2.30	Ti= 2.30	Sb= 2.36

Les Configurations électroniques de valence des atomes constituant les alliages Half-heusler étudiées sont :

- **Fe** : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$
- **Cr** : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$
- **Ti** : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
- **Sn** : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^2$
- **Sb** : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^3$

III.3. Propriétés structurales :

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la structure half Heusler est caractérisée par l'interpénétration de trois arrangements atomiques non équivalents α , β , γ possibles dans ce type de structure. Dans cette partie, nous allons voir dans quels arrangements nos deux matériaux sont plus stable.

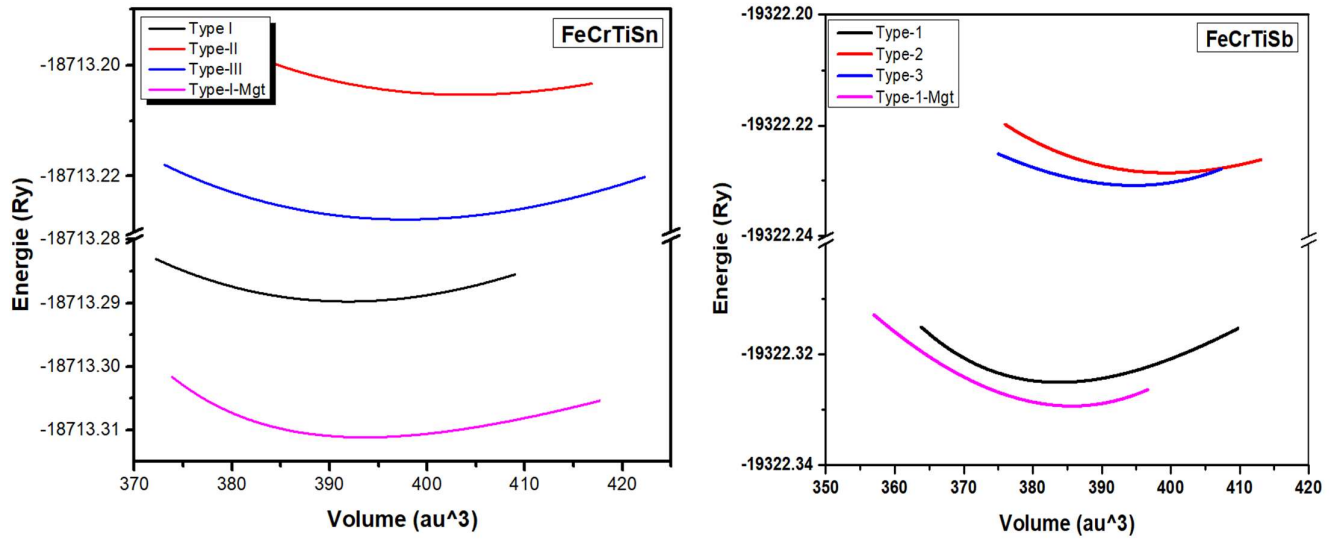
Pour cela, les données structurales à l'équilibre sont déterminées par ajustement de l'énergie totale en fonction du volume à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [5] pour les trois différents types possibles puis on déduit le type correspondant à cette structure la

plus stable.

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

Où V_0 , E_0 sont respectivement le volume et l'énergie d'équilibre.

En examinant attentivement ce courbe de fittage, l'optimisation de l'énergie totale révèle que le composé a une énergie plus faible dans la phase α par rapport aux deux autres phases β et γ . Les résultats obtenus sont montrés sur **Figures III.2**.



Figures III.2. L'énergie totale en fonction du volume du FeCrTiX pour les trois arrangements Atomiques α , β et γ .

Tableau III.2. Les valeurs de paramètre de maille et volume obtenus à l'équilibre.

	FeCrTiSn	FeCrTiSb
E_0 (Ry)	-18713.311159	-19322.329296
a (Å)	6.1559	6.1142
B_0 (GPa)	177.8460	262.4486
B'	23.7584	-6.9943
Autre calc	6.11	6.08
Exp		

III.4. Etude des propriétés électroniques :

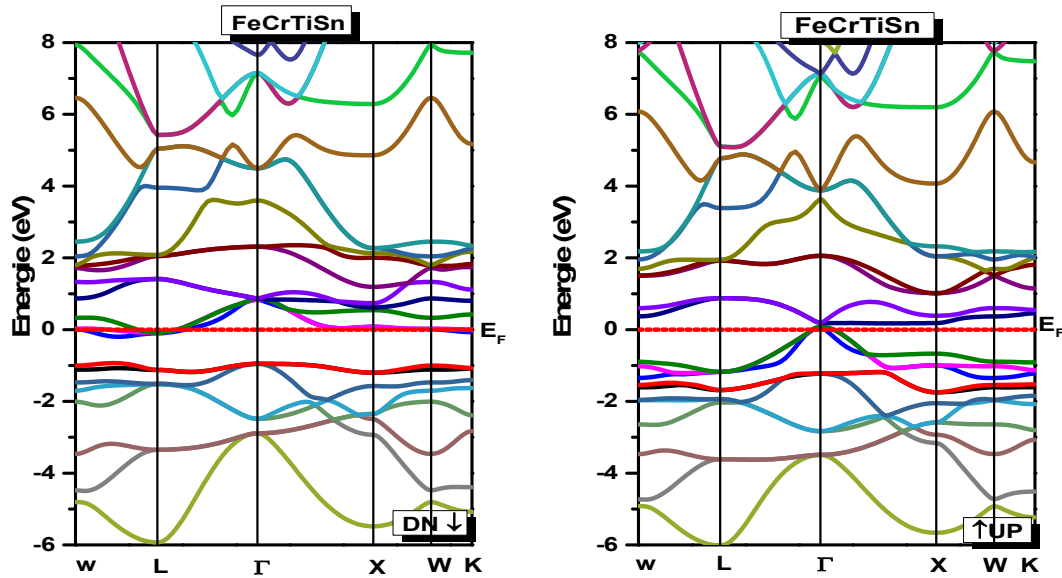
La compréhension de la structure électronique d'un matériau nécessite l'étude de la structure de bande électronique et la densité d'états partielle et totale (PDOS et TDOS) qui vont nous permettre d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau.

III.4.1. Structure de bande :

La structure de bande représente les énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes représentées dans l'espace réciproque et pour simplifier les calculs. Seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées.

❖ *Pour FeCrTiSn*

La figure (III.3) montre les structures de bandes de composé FeCrTiSn pour un spin down et up calculé le long des lignes de plus haute symétrie a été réalisé par la méthode FPLAPW+LO en utilisant les approximations GGA-PBE.

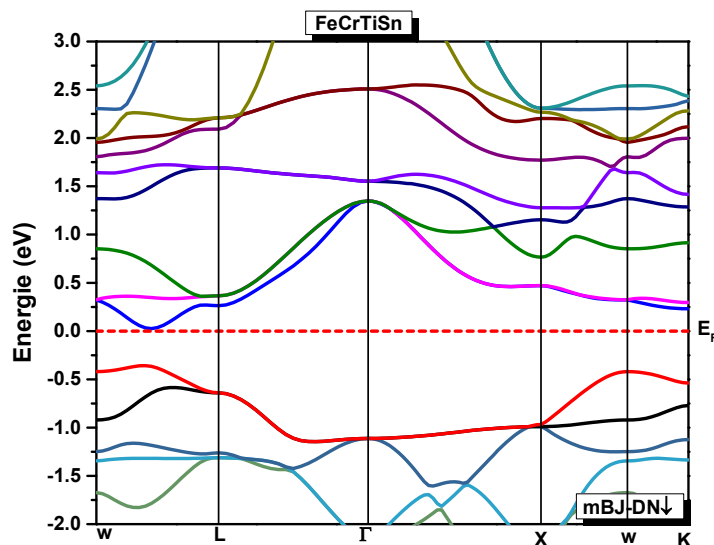


Figures III.3 Structures de Bande électronique du composé FeCrTiSn

Nous constatons que pour le matériau FeCrTiSn présente un gap 0 eV, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent au point de haute Symétrie Γ . On considère ce matériau comme metal.

RESULTAT ET DISCUSSION

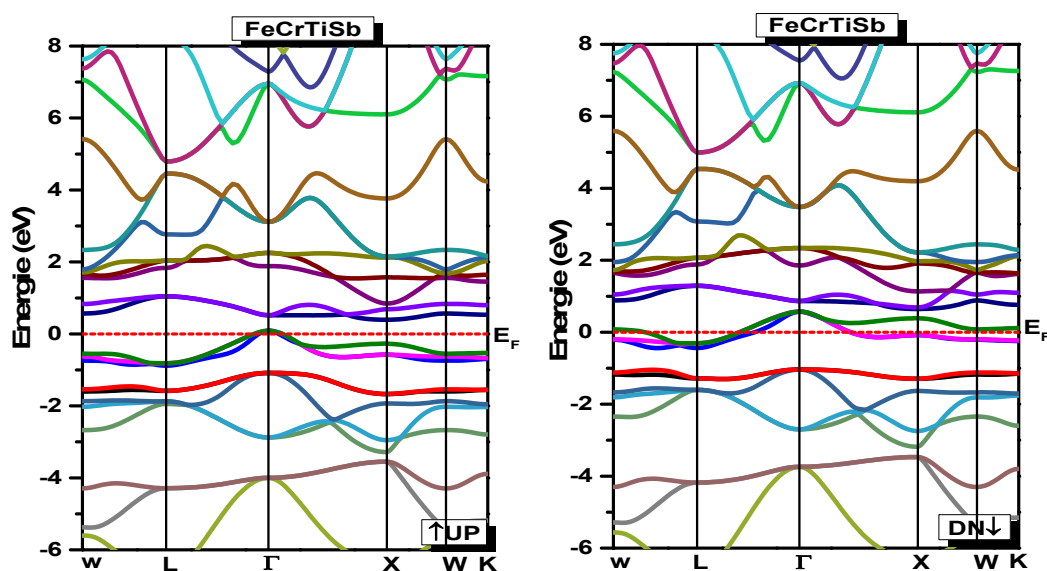
Pour augmenter le résultat nous utilisons la méthode de mBJ figure (III.4).



Figures III.4 Structures de Bande électronique du composé FeCrTiSn Avec mBJ

❖ *Pour FeCrTiSb*

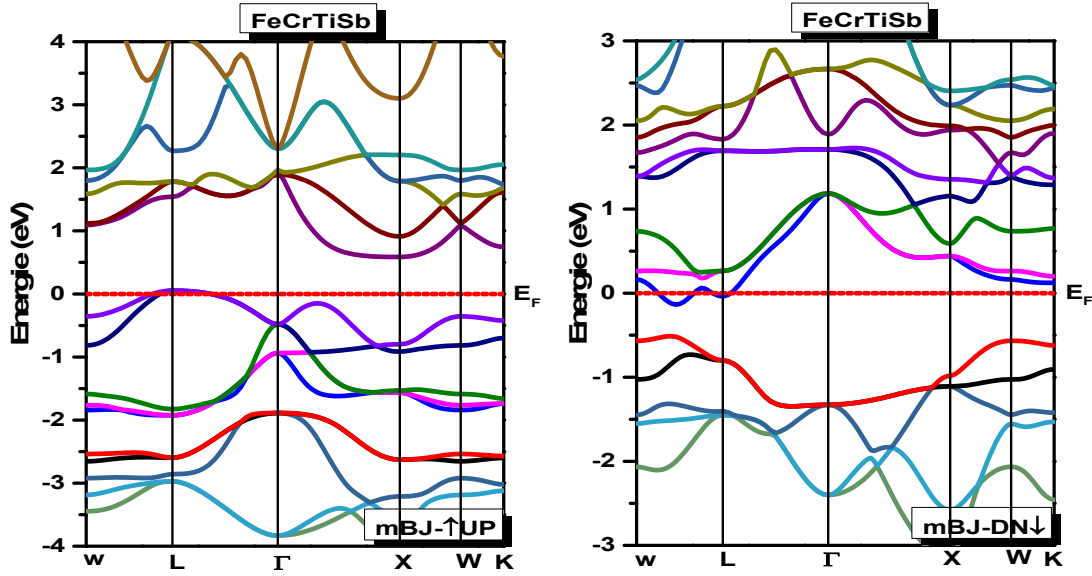
La figure (III.5) montre les structures de bandes de composé FeCrTiSn pour un spin down et up calculé le long des lignes de plus haute symétrie a été réalisé par la méthode FPLAPW en utilisant les approximations GGA-PBE.



Figures III.5 Structures de Bande électronique du composé FeCrTiSb

RESULTAT ET DISCUSSION

Pour augmenter le résultat nous utilisons la méthode de mBJ figure (III.6).



Figures III.6 Structures de Bande électronique du composé FeCrTiSb Avec mBJ

III.4.2. Densités d'états totaux et partiels (DOS) :

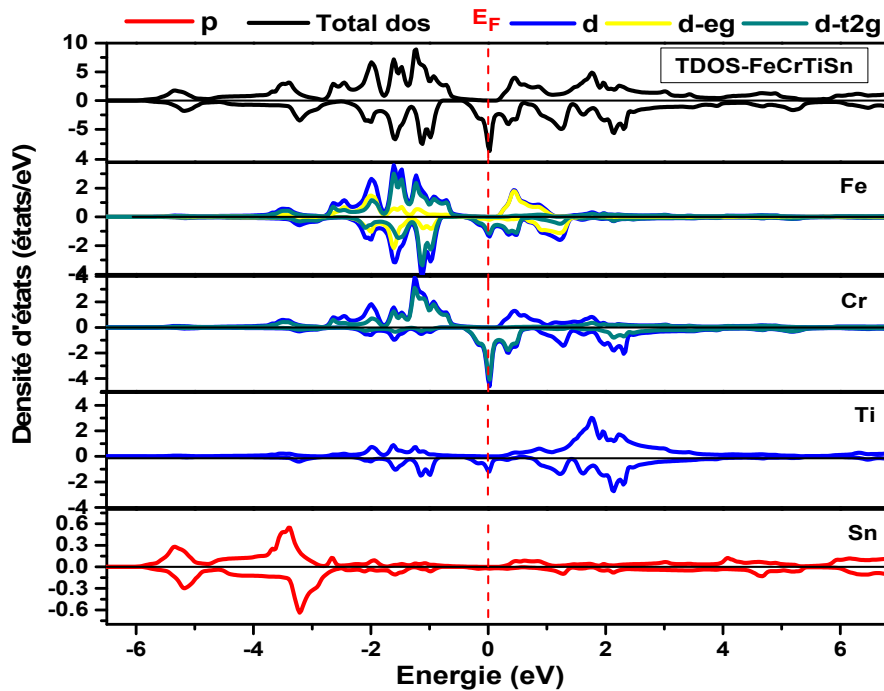
La densité d'état électronique (DOS) est l'une des propriétés électroniques les plus importantes qui nous renseigne sur le comportement et le caractère électronique du système. Elle nous permet aussi de connaître la nature des liaisons chimiques entre les atomes d'un cristal ou d'une molécule. A partir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

Les figures (III.7-III.8), illustrent les densités d'états totales et partielles de composé FeCrTiX obtenues par l'approximation GGA-PBE.

❖ Pour FeCrTiSn

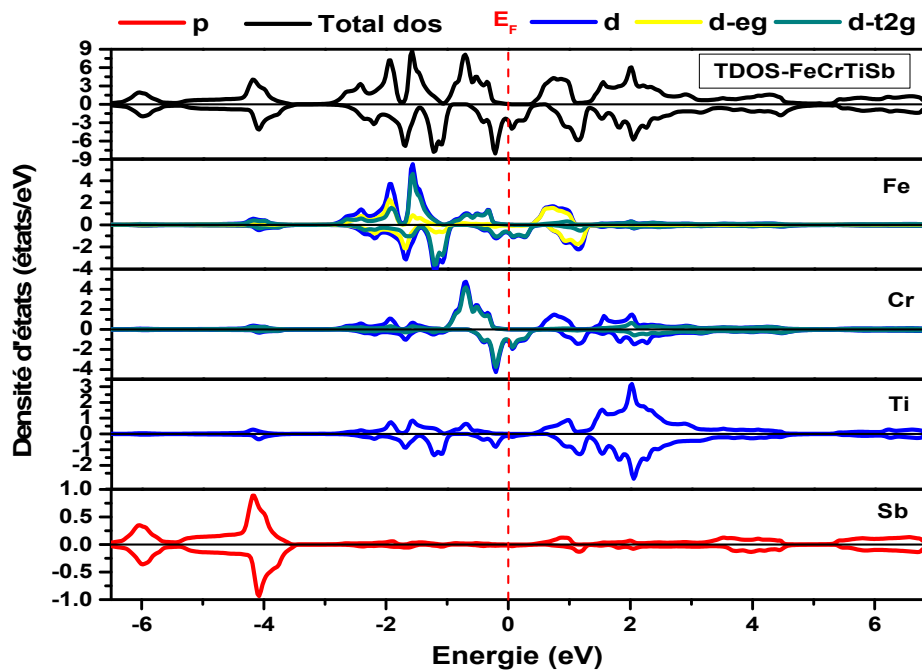
- La première région est localisée à environ (-7 eV à -2 eV), elle est composée principalement avec une faible contribution des états *Sn-p*
- La première région est localisée à environ (-2 eV à 0 eV), elle est composée principalement des états *Fe-d-t2g*, *Cr-d-t2g*, *Fe-d*, *Cr-d* et *Fe-d-eg* avec une faible contribution des états *Ti-d*.
- La bande de conduction est dominée par les états *Ti-d* et à son état mixte avec l'état *Cr-d*.

RESULTAT ET DISCUSSION



Figures III.7 Densité d'états totale et partielle du FeCrTiSn en utilisant le GGA-PBE.

❖ Pour FeCrTiSb



Figures III.8 Densité d'états totale et partielle du FeCrTiSb en utilisant le GGA-PBE.

RESULTAT ET DISCUSSION

- La première région est localisée à environ (-7 eV à -2 eV), elle est composée principalement avec une faible contribution des états *Sb-p*
- La première région est localisée à environ (-2 eV à 0 eV), elle est composée principalement des états *Fe-d-t2g*, *Cr-d-t2g*, *Fe-d*, *Cr-d* et *Fe-d-eg* avec une faible contribution des états *Ti-d*.
- La bande de conduction est dominée par les états *Ti-d* et à son état mixte avec l'état *Cr-d*.

III.5. Propriétés magnétiques :

La densité d'état Dans ce qui suit, nous allons étudier le comportement magnétique pour les différents composés avec des différentes concentrations des électrons de valence. Le Tableau III.3 regroupe les résultats et les valeurs obtenues pour le moment magnétique total et local en (μ_B) à l'équilibre pour les alliages FeCrTiSn et FeCrTiSb.

Tableau III.3. Le Moments magnétiques en (μ_B) de FeCrTiSn et FeCrTiSb obtenus par GGA

Composé	μ_{Fe}	μ_{Cr}	μ_{Ti}	$\mu_{Sn/Sb}$	μ_{int}	μ_{Tot}
FeCrTiSn	0.50	1.88	-0.38	-0.02	0.018	2
FeCrTiSb	0.50	0.75	-0.23	-0.009	-0.01	1

Références bibliographies

- [1] W. Kohn and L. J. Sham, Physical review 140, A1133 (1965).
- [2] E. Sjöstedt, L. Nordström, and D. Singh, Solid state communications 114, 15 (2000).
- [3] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties (2001).
- [4] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen and K. H. J. Buschow: Appl. Phys. 55 2151 (1984)
- [5] F.D.Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30, 5390, (1944).
- [6] Prakash, R., & Kalpana, G. (2023). First-principles study on novel Fe-based quaternary Heusler alloys, with robust half-metallic, thermoelectric and optical properties. *RSC Advances*, 13(16), 10847–10860. <https://doi.org/10.1039/d3ra00942d>

CONCLUSION

GENERALE

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le but de mémoire concerne l'étude ab initio des propriétés structurales, magnétique, électroniques, optiques du composé. Ce travail a été effectué en utilisant la méthode des Ondes Planes Linéairement Augmentées avec Potentiel total (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le calcul a été effectué en utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA) intégré dans le code Wien2k pour le potentiel d'échange-corrélation.

Nous avons expliqué dans la premier chapitre quelques concepts qui concerne des études que nous ferons, comme les alliages Heusler. Comme nous l'avons fait présentation des méthodes de calcul permettent le calcul des propriétés des matériaux.

La deuxième section les méthodes de calcul et le code wien2k

La troisième section de notre travail nous avons étudié des propriétés structurales de composer FeCrTiX X(Sn,Sb). L'énergie totale montre que notre matériau est plus favorable dans la phase α .