



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT  
Institut Des Sciences Et Technologies  
Département Des Sciences De La Matière



# *Mémoire Master*

*Présenté par :*

- *CHEHAT Wissem*
- *SAHLI Sarra*

*Filière : PHYSIQUES*

*Spécialité : Nano-Physique*

*Intitulé :*

*Effet de la structure cristalline sur les propriétés électroniques des Heuslers*

*Devant le jury composé de :*

M <sup>r</sup> DJOUDI Lakhdar	Président	Pr. Centre Universitaire Tissemsilt
M <sup>r</sup> BENALIA Salah Eddine	Encadreur	Pr. Centre Universitaire Tissemsilt
M <sup>r</sup> . ZEROUKI Tayeb	Examineur	M.A.A. Centre Universitaire Tissemsilt

*Année universitaire : 2019/2020*

## ***Dédicace :***

*Je dédie ce modeste travail :*

*A mon meilleur exemple ma mère "Mimouna".*

*A l'âme de mon père "M'hammed".*

*A mon cher mari "Chahet Abd El-kader".*

*A ma belle-mère "Yema Aisha" que Dieu la protège.*

*A mes frères {Rabeh, El Hadj, Rachid, Sofiane et Issa} et à leurs femmes et leurs enfants.*

*A mes sœurs {Zakhrofa, Fatima, Iman et Hanen} et à leurs Marri {Ben-Tamra, Hmida et Bakhti} et leurs enfants.*

*A mes amies {Sellaf Chaimaa, Yousfi Chaimaa, Azizi khadidja et Chehat Wissem}.*

*A toute la famille Sahli, Hamla et Chahet.*

*Et à tous ceux qui ont donné une contribution ceux de réalisation de ce mémoire.*

♥Sarra♥

## ***Dédicace :***

*Je dédie ce modeste travail :*

*A mon meilleur exemple ma mère Fadhila.*

*A l'âme de mon père Ahmed en qui j'ai trouvé le soutien indéfectible durant toutes mes études.*

*A ma chère grande mère Soltana que son amour et ses prières me protègent.*

*A ma petite famille, mon cher mari Bakel Abdelkader et mon ange Idriss.*

*A mon frère Oussama et ma petite belle sœur Sirine.*

*Au grand père et à la grand mere de mon fils*

*A mes sœur Asma, Sarra et Hdjer*

*A toutes les familles Chehat, Bazzi et Bakel.*

*Et à tous ceux qui ont donné une contribution ceux de réalisation de ce mémoire.*

♥ Wissem ♥

## **Remerciements :**

*Nous remercions en premier lieu Dieu (Allah) le tout puissant de nous avoir données la puissance la volonté et la santé durant toutes ces années pour finir ce modeste travail.*

*Nous tenons à exprimer notre gratitude et reconnaissance à notre encadreur le professeur **BENALIA Salah Eddine** qui nous proposées ce sujet, pour son soutien et son aide, nous le remercie aussi pour la confiance qu'il nous avait accordées au cours de cette année.*

*Je remercie sincèrement Monsieur **DJOUDI Lakhdar** Professeur au centre universitaire de Tissemsilt d'avoir accepté de présider le jury.*

*Je tiens à exprimer mes remerciements à Monsieur **ZERROUKI Tayeb** maître de conférences classe A au centre universitaire de Tissemsilt d'avoir accepté d'examiner ce travail. pour avoir nous honorées et faire partie de notre jury.*

*Nous remercions nos parents et nos frères et toute la famille, et n'oublions pas nos amies et surtout «AZIZI Khadija ».*

**Abstract :**

The main objectif of this research is to study alloys Heusler of **Li<sub>2</sub>XY** (**X=Ag, Cu, Pd**) And (**Y=Sb, Te**), with his two phases (**X<sub>A</sub>**) and (**L<sub>21</sub>**) and the effect of its structures on the electronic properties, using the Local Density Approximation (**LDA**) based on Density Functionl Theory (**DFT**) accross the method of all-electon Full-Potential Linearized Muffin-Tin Orbitals (**FP-LMTO**) implemented in the **Mindlab** calculation code, This allowed determine the optimized parameter (**a<sub>0</sub>**), the bulk modulus (**B**) and it's derivative (**B'**), band structures, gap values in energy.

**Key words:**

Heusler, **DFT. FP-LMTO.**

**Résumé :**

L'objectif principal de cette recherche est d'étudier les alliages Heusler de **Li<sub>2</sub>XY** (**X=Ag, Cu, Pd**), (**Y=Sb, T**) avec ses deux phases (**X<sub>A</sub>**) et (**L<sub>21</sub>**) et l'effet de ses structures sur les propriétés électroniques, en utilisant l'approximation de la densité locale **LDA** basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité **DFT** à travers la méthode orbitale linéaire plein potentiel muffin-tin **FP-LMTO** implémenté dans le code de calcul **Mindlab**, cela a permis de déterminer le paramètre de maille (**a<sub>0</sub>**), optimisé le module de compressibilité (**B**) et sa dérivé (**B'**), les structures de bandes, les valeurs des gaps en énergie.

**Mots clés :**

Heusler, **DFT. FP-LMTO.**

## المخلص:

هدف هذا البحث هو دراسة الهوسلر  $\text{Li}_2\text{XY}$  ( $\text{X}=\text{AG, Pd, Cu}$ ) و ( $\text{Y}=\text{Sb, Te}$ ) المتبلور في البينيتين ( $\text{Xa}$ ) و ( $\text{L21}$ ) وذلك لمعرفة تأثير البنية على الخصائص الإلكترونية وهذا بإستخدام طريقة الكمون الكلي لكل الالكترونات و المدارات **FP-LMTO** المدرجة في برنامج المحاكاة **Mindlab** وتقريب الكثافة الموضعية **DFT** في إطار النظرية الدالية للكثافة الخطية **LDA** قصد دراسة خصائص الخلية ( $\text{B}$ ,  $\text{B}'$  و  $\text{a}_0$ ), وقيم فجوة الطاقة.

## الكلمات المفتاحية:

الهوسلر، **DFT** ، **FP-LMTO**

## Liste des figures :

- Figure. I.1** Tableau périodique montrant les éléments X, Y et Z typiques dans les composés de Heusler.
- Figure. I.2** Représentation schématique du sel de roche, de la structure du Zinc-blende et demi-Heusler.
- Figure. I.3** Représentation de diverses structures d'alliages Heusler complets.
- Figure. I.4** illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles des composés Heuslers quaternaires (a) type 1, (b) type 2 et (c) type 3.
- Figure. I.5** Les types des Heuslers.
- Figure. I.6** L'effet Jonctions Tunnel Magnétiques (MTJ).
- Figure. I.7** Schéma de l'effet TMR dans un MTJ.
- Figure. II.1** Fenêtre de dialogue Mstudio-Mindlab.
- Figure. II.2** La structure de l'alliage  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans les deux phases.
- Figure. II.3** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgT}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.4** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgT}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.5** La structure de l'alliage  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans les deux phases.
- Figure. II.6** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase  $X_A$ .
- Figure. II.7** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.8** La structure de l'alliage  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans les deux phases.
- Figure. II.9** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.10** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.11** La structure de l'alliage  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans les deux phases.
- Figure. II.12** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.13** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $L2_1$ ).

- Figure. II.14** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.15** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.16** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.17** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.18** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.19** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $L2_1$ ).
- Figure. II.20** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $X_A$ ).
- Figure. II.21** La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $L2_1$ ).

## Liste des tableaux :

- Tableau. I.1 :** Les deux phases cristallographiques des Heuslers.
- Tableau. II.1 :** Le paramètre du réseau ( $a$ ), module de compressibilité ( $B$ ), dérivée du module de compressibilité ( $B'$ ) pour  $\text{Li}_2\text{AgTe}$ .
- Tableau .II.2 :** Le paramètre du réseau ( $a$ ), module de compressibilité ( $B$ ), dérivée du module de compressibilité ( $B'$ ) pour  $\text{Li}_2\text{AgSb}$ .
- Tableau. II.3 :** Le paramètre du réseau ( $a$ ), module de compressibilité ( $B$ ), dérivée du module de compressibilité ( $B'$ ) pour  $\text{Li}_2\text{PdTe}$ .
- Tableau. II.4 :** Le paramètre du réseau ( $a$ ), module de compressibilité ( $B$ ), dérivée du module de compressibilité ( $B'$ ) pour  $\text{Li}_2\text{CuSb}$ .

## Liste des abréviations :

<b>ASA</b>	L'Approximation des sphères atomiques.
<b>DFT</b>	La théorie de la fonctionnelle de la densité.
<b>FP-LMTO</b>	La méthode des orbitaux muffin–tin linéarisées avec un potentiel total.
<b>HMF</b>	Half-metallic ferromagnets.
<b>IUPAC</b>	L'Union internationale de chimie pure et appliquée.
<b>LDA</b>	L'Approximation du la densité locale.
<b>TMR</b>	Magnéto-résistance à l'effet tunnel.
<b>GMR</b>	Magnéto-résistance géante.
<b>MT</b>	Muffin –Tin.
<b>MTJ</b>	Jonctions Tunnel Magnétiques.

# Sommaire :

<b>Introduction générale</b> .....	<b>1</b>
• Les références.....	<b>2</b>
<b>Chapitre I : Les Heuslers</b> .....	<b>3</b>
i. Introduction .....	<b>4</b>
ii. Historique.....	<b>4</b>
iii. Les alliages Heusler.....	<b>4</b>
iii .1. Les types des Heuslers.....	<b>6</b>
iii.1.1. Demi-Heusler (half-heusler).....	<b>6</b>
iii.1.2. Heusler complet (Full-Heusler).....	<b>7</b>
iii.1.3. Heusler quaternaires.....	<b>8</b>
iii.1.4. Heusler désordonné (inverse).....	<b>8</b>
iv. La classification des Heuslers.....	<b>9</b>
v. Les applications des Heuslers.....	<b>10</b>
• Conclusion.....	<b>12</b>
• Les références.....	<b>13</b>
<b>Chapitre II : Résultats et Discussions</b> .....	<b>16</b>
i. Introduction.....	<b>17</b>
ii. Méthode de calcul.....	<b>17</b>
iii. Résultats et discussion.....	<b>19</b>
iii.1.Propriétés structurales.....	<b>19</b>

iii.1.a La stabilité structurale.....	19
➤ $\text{Li}_2\text{AgTe}$ .....	20
➤ $\text{Li}_2\text{AgSb}$ .....	22
➤ $\text{Li}_2\text{PdTe}$ .....	24
➤ $\text{Li}_2\text{CuSb}$ .....	26
iii.2.Propriétés électroniques.....	29
iii.2.a. Structure de bandes d'énergie.....	30
• Les références.....	35
<b>Conclusion générale et perspectives .....</b>	<b>37</b>
Conclusion générale.....	38
Perspectives.....	39

# Introduction générale

La physique du matériau s'est développée notablement au cours des cinquante dernières années dans les domaines expérimental et théorique, les applications de cette théorie utilisent les outils et les méthodes informatiques pour modéliser les composés réels même ceux à structure complexe, à l'échelle atomique les méthodes de modélisation permettent de comprendre l'organisation de la matière solide et d'obtenir ces propriétés.

Les méthodes de simulation ont joué un rôle très important dans la détermination des différentes propriétés et ont donné une nouvelle dimension à l'investigation d'un monde de nombreux phénomènes physiques et chimiques. Ces phénomènes, qui régissent les propriétés électroniques et magnétiques des matériaux, parmi lesquelles la spintronique « l'électronique de spin », sont l'objet de nombreuses études fondamentales [1]. Les matériaux objet de la spintronique, dont les composés Heuslers, sont étudiés depuis de nombreuses années.

Les alliages **Heuslers** ont attiré l'attention grâce aux caractéristiques pratiques importantes telles que la spintronique et la magnéto-électronique [2,3]. Par ailleurs, ces composés restent attractifs pour d'autres applications techniques comme les dispositifs d'injection de spin [4], les filtres à spin [5], les jonctions de tunnels [6] ou les dispositifs Magnétorésistance Géante (**GMR**) [7,8] en raison de haute température de Curie par rapport à ces composés [9].

Le travail que nous présentons dans ce mémoire comprend :

- Une introduction générale dans laquelle on a cité le rôle de la simulation et la modélisation en science des matériaux.
- Le chapitre **I**, représente une description de la structure cristalline des **Heuslers** ainsi que leur domaine d'application.
- Le chapitre **II**, rappelle les principes fondamentaux de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et résume nos résultats et leurs interprétations.
- Nous terminerons notre mémoire par une conclusion générale.

## Référence

- [1] P. Sabatier, Mag. Scien **23**, 06 (2012).
- [2] R. A. Groot, F. M. Mueller, P. G. vanEngen, K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett **50**, 2024 (1983).
- [3] M. Julliere, Phys. Lett. **A54**, 225 (1975).
- [4] R. Pandey, J. E. Jaffe , A.B Kunz, Phys. Rev. **B43**, 9228 (1991).
- [5] Y. Miura, H. Uchida, Y. Oba, K. Abe , M. Shirai, Phys. Rev. **B78**, 064416(1) (2008).
- [6] B. Hülsen, M. Scheffler , P. Kratzer, Phys. Rev. **B79**, 094407(1) (2009).
- [7] S. Yuasa, A. Fukushima, H. Kubota, Y. Suzuki ,K. Ando, Appl. Phys. Lett. **89**, 042505(1) (2006).
- [8] S. S. P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P. M. Rice, B. Hughes, M. Samant , S.H. Yang, Nat. Mat. **3**, 862 (2004).
- [9] I. Zutic, J. Fabian , S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

# Chapitre I

## Les Heuslers

## **i. Introduction :**

Grace à la structure électronique et les différentes propriétés physiques des Heuslers, ces derniers semblent être des matériaux de choix pour beaucoup d'applications. Ils ont une multitude de différentes propriétés physiques, allant des composés demi-métalliques ferromagnétiques [1, 2], des antiferromagnétiques complètement compensés [3] à semi-conducteurs non magnétiques [4, 5], et même supraconducteurs [6, 7]. Parmi lesquels, on peut citer quelques-uns : les ferromagnétiques ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  [8]), les ferrimagnétiques ( $\text{Mn}_2\text{VAl}$  [9]), les semi-conducteurs ( $\text{Fe}_2\text{VAl}$  [10]), les systèmes de fermions lourds ( $\text{Cu}_2\text{CeIn}$  [11]), et les supraconducteurs ( $\text{Ni}_2\text{ZrGa}$  [12]). Cette richesse de particularités est exploitée dans les domaines de la spintronique, de l'optoélectronique et de la magnéto-optique. Ces dernières années, de nouveaux domaines ont vu le jour tel que les technologies environnementales comme la thermoélectrique [13, 14] et la technologie des cellules solaires [15].

## **Historique :**

En 1903, **Friedrich Heusler** a découvert un composé dont le terme **Heusler** est dérivé de son nom [18]. Ce composé contient deux parties de cuivre, une partie de manganèse et une partie d'étain, qui est  $\text{Cu}_2\text{MnSn}$ , il se comporte comme un ferromagnétique bien que ses éléments constitutifs ne soient pas magnétiques, son magnétisme varie considérablement avec le traitement thermique et la composition [19].

En 1934, Bradley et Rogers ont montré que la phase ferromagnétique à température ambiante était une structure entièrement ordonnée de type ( $\text{L}2_1$ ) [20] ceci a un réseau cubique primitif d'atomes de cuivre avec des cellules alternées centrées sur le corps par le manganèse et l'aluminium.

Ces matériaux remarquables comprennent maintenant une vaste collection de plus de 1000 composés. Ce sont des matériaux semi-conducteurs ou métalliques ternaires avec un mélange connu également sous le nom "**Half-Heusler**" ou d'un mélange stœchiométrie connu sous le nom du "**Full-Heusler**" [21].

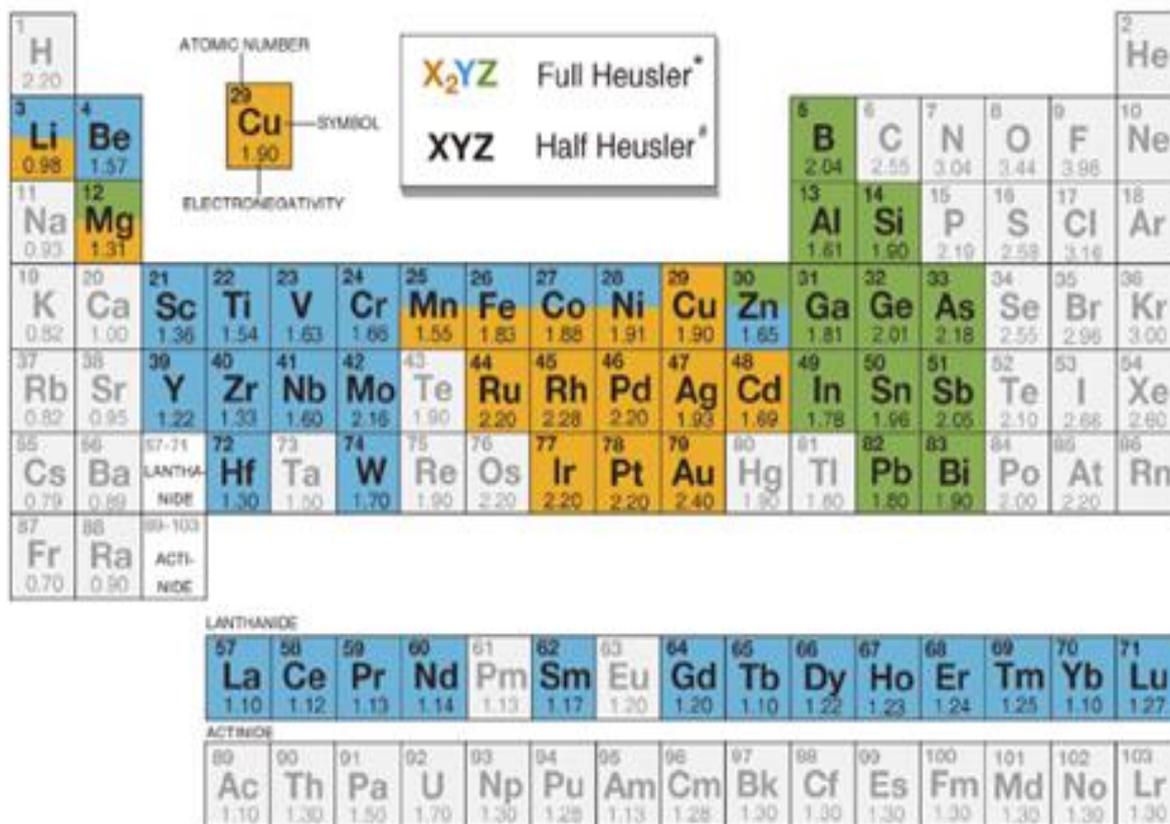
## **i. Les alliages Heusler :**

Dans le passé, les composés **Heusler** ont été considérés comme des alliages Intermétalliques, bien que la description en tant que composé intermétallique est plus appropriée en raison de

# Chapitre I: Les Heuslers

leur ordre atomique caractéristique, les **Heusler** sont des systèmes ternaire de composition stœchiométrique avec une formule générale  $X_2YZ$ .

Dans cette classe, X et Y représentent des métaux de transitions, et Z est un élément des colonnes (III, IV et V) dans le tableau périodique (**Figure. I.1**) ; Cependant, dans certains cas, Y est remplacé comme un élément de terre rare ou d'un métal alcalino-terreux. Traditionnellement, le métal, qui existe deux fois, est placé au début de la formule, tandis que l'élément du groupe principal est placé à l'extrémité, par exemple :  $Co_2MnSi$ ,  $Fe_2VAl$  [22,23]. Les exceptions sont les composés, dans lequel un élément peut définitivement être défini pour être plus électropositif, par exemple :  $LiCu_2Sb$  et  $YPd_2Sb$  [24]. Ici, l'élément électropositif est mis au début en accord avec la nomenclature de l'Union Internationale de Chimie Pure et Appliquée (IUPAC).

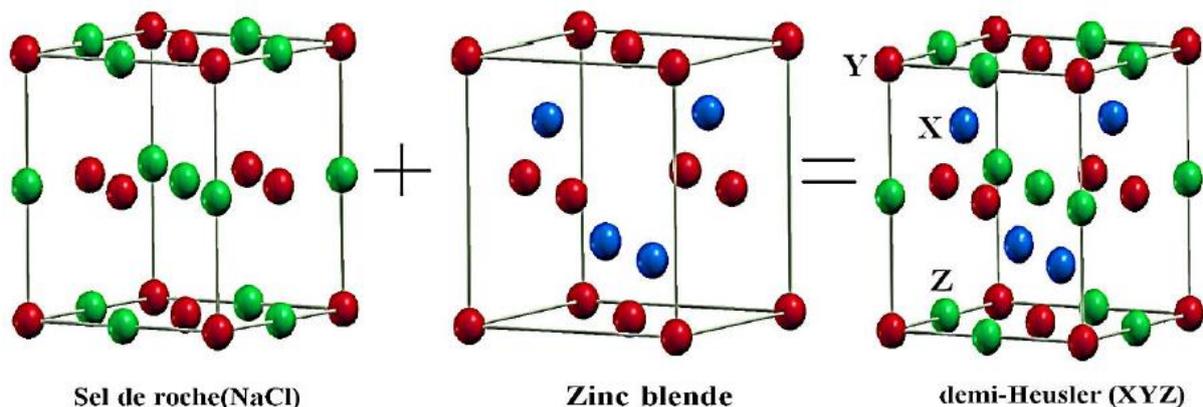


**Figure. I.1** : Tableau périodique montrant les éléments X, Y et Z typiques dans les Heusler.

## iii.1. Les types des Heuslers :

### iii.1.1. Demi-Heusler (Half-Heusler) (XYZ) :

Les alliages de cette famille ont une composition chimique de forme XYZ. La structure de **demi-Heusler** se compose de trois sous-réseaux cubiques face centre interpénétrant et remplis. La troisième structure CFC est décalée d'un quart ( $1/4$ ) de la cellule unitaire de la diagonale du corps de la structure du sel de roche B1 (NaCl) [25]. En principe, les **demi-Heuslers** forment une variante farcie de semi-conducteurs classiques à coquilles fermées d'électrons qui cristallisent dans un réseau de Zinc blende B3 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 [26]. La relation entre ces différents réseaux cristallins est affichée dans la (**Figure. I.2**). 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 ( $1/2,1/2,1/2$ ), 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 ( $1/4, 1/4, 1/4$ ), laissant l'autre position 4d ( $3/4,3/4,3/4$ ) 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 [27].



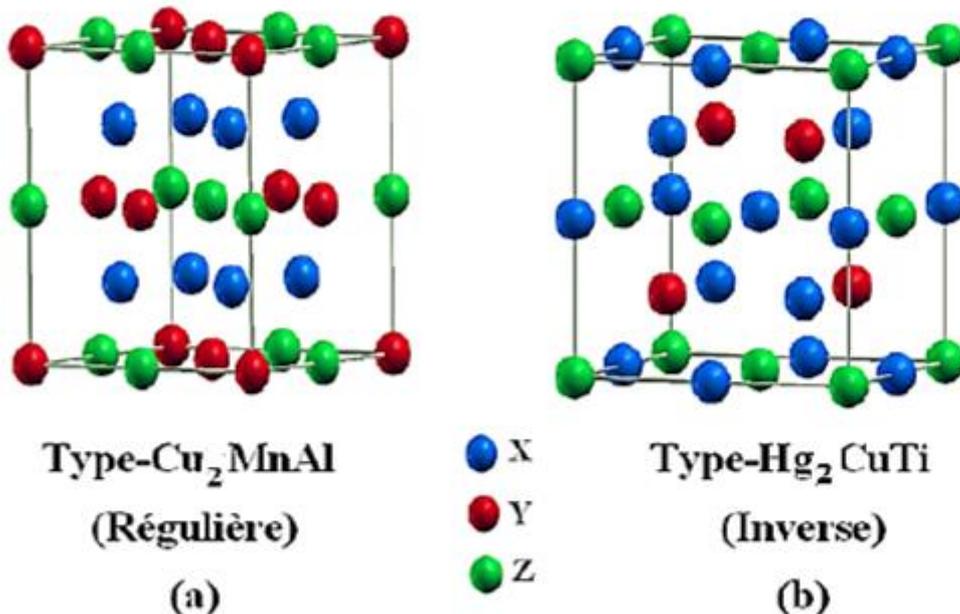
**Figure. I.2 :** Représentation schématique du sel de roche, de la structure du Zinc-blende et demi-Heusler [28].

### iii.1.2. Heusler complet (Full-Heusler):

Ce type des **Heuslers** sont composés intermétalliques ternaires qui peuvent être définis par la formule stœchiométrique  $X_2YZ$ , X et Y sont des éléments de groupes III, IV ou V.

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

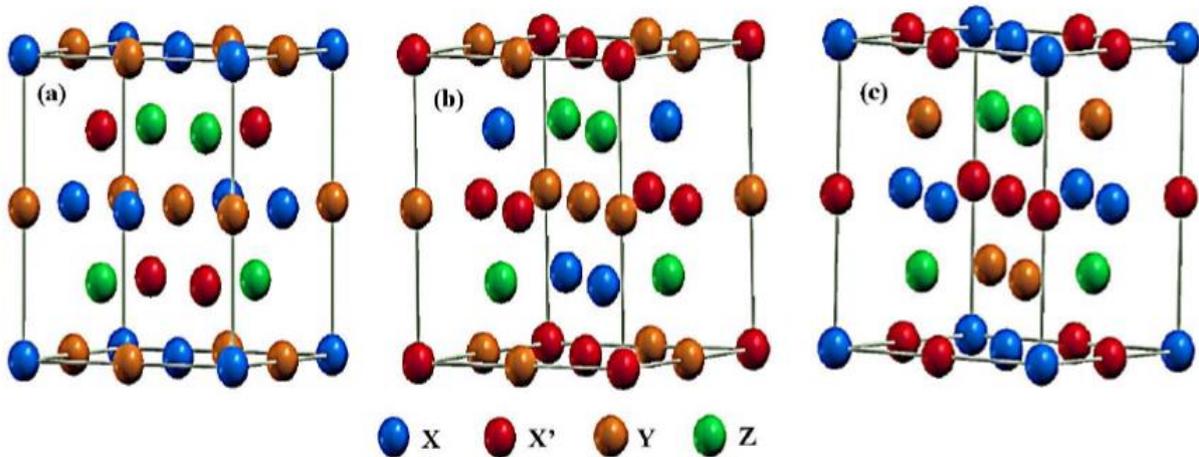
- Structure cubique régulière de **Heusler** (Type- $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ) avec groupe spatial  $Fm\bar{3}m$  (N 225), [29]. Si le nombre atomique de X est supérieur à ( $Z(Y) > Z(X)$ ), les deux atomes de X sont des sites tétraédriques, c'est-à-dire les emplacements (0, 0, 0) et (1/2, 1/2, 1/2), 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- $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) avec le groupe spatial  $F\bar{4}3m$  (N 216) [30]. 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 [28].

### iii.1.3. Heusler quaternaires ( $XX'YZ$ ) :

Ces composés est 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 [31]. Lorsque l'un des deux atomes  $X$  dans les composés  $X_2YZ$  (**composés Heusler complets**) est remplacé par un métal de transition différent  $X'$ , un composé quaternaire avec la composition  $XX'YZ$  peut désigner pour **Heusler quaternaire**, où  $X$ ,  $X'$  et  $Y$  représentent des métaux de transition et  $Z$  représente les éléments de groupe principal.  $XX'YZ$  cristallise dans un  $\text{LiMgPdSn}$  (**Figure. I.4**).

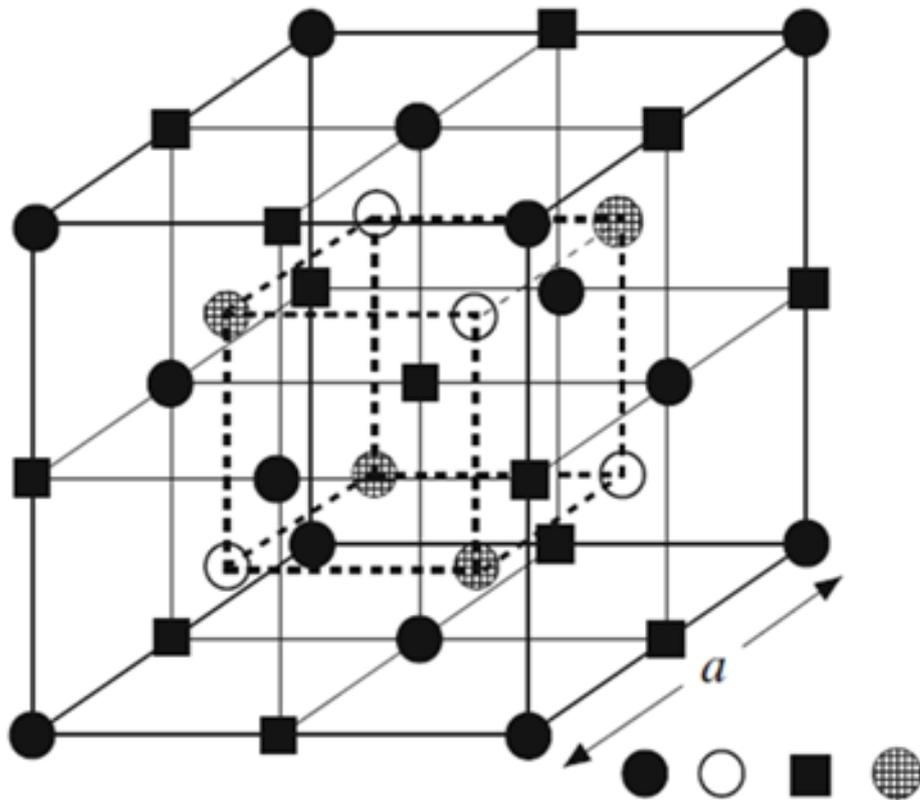


**Figure. I.4 :** Illustration schématique des trois structures non équivalentes possibles des composés Heuslers quaternaires (a) type 1, (b) type 2 et (c) type 3[28].

### iii.1.4. Heusler désordonné (inverse) :

De nombreux alliages **Heusler** cristallisent dans la structure  $L2_1$  puis désordonnent dans les structures B2 ou A2 à des températures élevées. Lorsque la température augmente, le réseau gagne plus d'énergie thermique  $E$  [28].

On peut résumer tous les types des **Heuslers** par un schéma illustré dans la **figure. I.5**.



	A	B	C	D
Demi-heusler : XYZ	X	Y		Z
Full-heusler : X <sub>2</sub> YZ	X	Y	X	Z
Quaternaire heusler : (XX')YZ	X	Y	X'	Z
Heusler désordonné : X <sub>2</sub> YZ	X	X	Y	Z

Figure. I.5 : Les types des Heuslers [32].

ii. La classification des Heuslers :

Une nouvelle classification se fait en fonction de l'ordre des atomes au sein de la maille cristalline. Les atomes peuvent s'arranger sous deux phases cristallographiques différentes (tableau. I.1) :

- La phase  $X_A$  : c'est la première phase dont tous les atomes sont parfaitement arrangés.
- La phase  $L2_1$  : c'est la deuxième phase dont les sites correspondants aux atomes **Y** et **Z** sont occupés de façon aléatoire par ces deux atomes.

La phase ( $X_A$ )	La phase ( $L2_1$ )
$X(0 \quad 0 \quad 0)$	$X(0 \quad 0 \quad 0)$
$X'\left(\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}\right)$	$X'\left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}\right)$
$Y\left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}\right)$	$Y\left(\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}\right)$
$Z\left(\frac{3}{4} \quad \frac{3}{4} \quad \frac{3}{4}\right)$	$Z\left(\frac{3}{4} \quad \frac{3}{4} \quad \frac{3}{4}\right)$

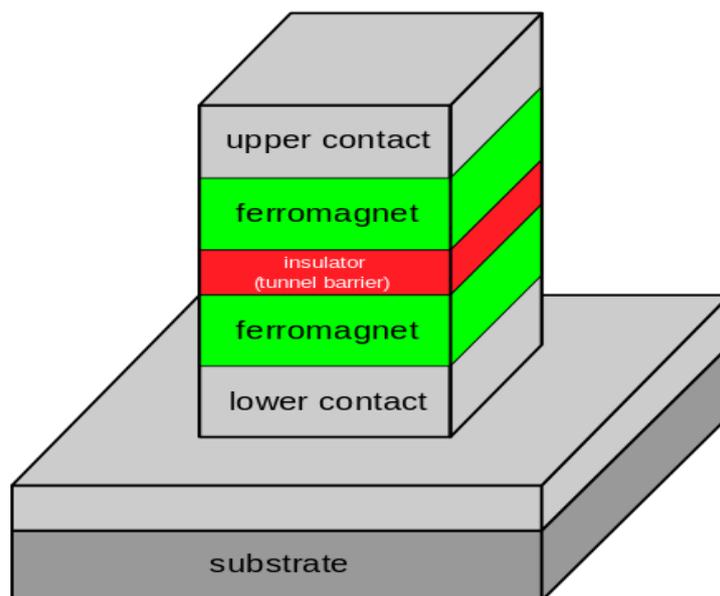
**Tableau. I.1** : Les deux phases cristallographiques des Heuslers.

L'ordre cristallographique peut modifier significativement les propriétés magnétiques des alliages **Heusler** comme l'aimantation à saturation où la température de Curie.

### iii. Les applications des Heuslers :

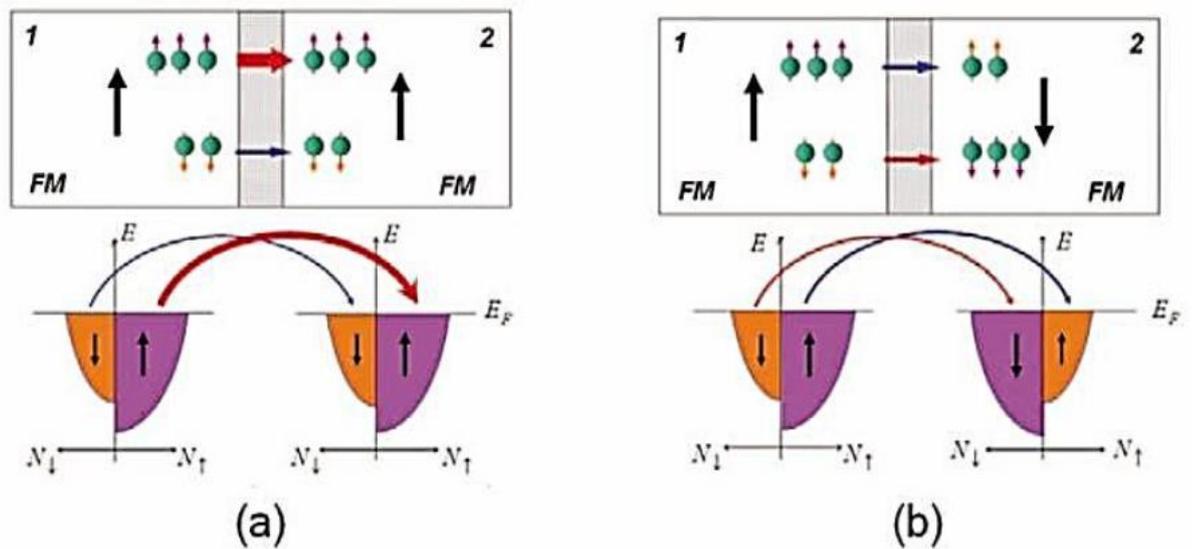
Au cours des dernières décennies, les alliages **Heusler** font l'objet d'un grand intérêt qui s'explique par la présence de propriétés bien adaptées pour des applications dans des dispositifs, telles que :

- **Jonctions Tunnel** : L'une des propriétés qui a contribué à la multiplication des travaux sur ces alliages est le caractère demi-métallique. Ce caractère a été prédit par de Groot et al. en 1983, pour les **Half-Heuslers** [33]. Par la suite, en 2002, Galanakis et al [34-35] ont prédit que les alliages **Full-Heusler** sont également des demi-métaux. En effet, ce caractère les place comme des candidats idéaux pour des électrodes dans des Jonctions Tunnel Magnétiques (**figure. I.6**).



**Figure. I.6**: L'effet Jonctions Tunnel Magnétiques (MTJ).

- Les électrodes :** Des travaux récents ont montré qu'en utilisant des matériaux Heusler comme des électrodes dans des **MTJ** permettent d'atteindre des valeurs élevées de **TMR**. Wang et al. ont mesuré une valeur de 330% avec une électrode de  $CO_2FeAl$ , et Ishikawa et al. Une valeur de 182% avec des électrodes de  $CO_2MnSi$  et une barrière de MgO. Bien que ces valeurs de **TMR** soient élevées, elles restent éloignées des attentes d'après la théorie. Cela montre que les mécanismes qui prennent place dans les **Heuslers** ne sont pas totalement compris et justifie l'intérêt d'une recherche actuelle sur ces alliages (**Figure. I.7**)



**Figure. I.7 :** Schéma de l'effet **TMR** dans un **MTJ**. Pendant ce processus, l'orientation des spins des électrons est préservée, c'est-à-dire qu'un électron ne peut tunneler que vers la sous-bande de spin ayant la même orientation de spin et que la conductance est proportionnelle au produit DOS au niveau de Fermi des deux électrodes ayant la même orientation de spin. Un changement de la configuration parallèle **(a)** à la configuration antiparallèle **(b)** des aimantations des deux électrodes entraîne un échange de la sous-bande de spin pour **l'électrode 2**, provoquant un changement correspondant dans la conductance [36].

- Température de Curie élevée :** Une autre caractéristique importante de ces alliages est leur température de Curie élevée, notamment dans les alliages **Full-Heuslers**. Cela s'explique par un couplage inter atomique robuste entre les différentes espèces formant l'alliage, d'où le fait que les Full-Heuslers, dont la maille ne possède pas des sites vacants, montrent des températures de Curie plus élevées que les **Half-Heuslers**.

Comme exemple, dans l'alliage  $CO_2MnSi$ , la température de Curie a été déterminée égale à 985 K et dans l'alliage  $CO_2FeGa$ , supérieure à 1100 K. A [37] différence d'autres demi-métaux comme la magnétite  $Fe_3O_4$ , dont la température de Curie est proche de la température ambiante, la température de Curie élevée des alliages **Heusler** les rend intéressants, d'un point de vue de la stabilité thermique, pour les applications dans des dispositifs. En plus de ces avantages, il a été prédit théoriquement que les alliages **Heusler** possèdent un facteur d'amortissement magnétique faible. En effet, Liu et al [38] ont montré théoriquement, que le paramètre d'amortissement magnétique de l'alliage  $CO_2MnSi$  est de  $0,6 \cdot 10^{-4}$ . Le facteur d'amortissement est étroitement lié à la réponse en fréquence du matériau.

- **Mémoire à forme magnétique :** Une autre caractéristique qui mérite d'être mentionnée est la capacité de certains alliages **Heusler** à modifier leur forme avec un champ appliqué. Sous l'effet d'un champ magnétique, la maille cristalline se déforme et lorsque le champ est enlevé, l'alliage reprend sa forme originelle. Cette caractéristique, appelée mémoire à forme magnétique, a beaucoup été étudiée dans l'alliage  $Ni_2MnGa$  qui peut atteindre jusqu'à 9% de déformation sous des champs relativement faibles.

Cependant, il reste beaucoup de mécanismes mal compris dans ces alliages et une meilleure compréhension devrait permettre de les rendre mieux adaptés aux besoins des technologies actuelles.

### Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons montré le contexte dans lequel ce mémoire est t'inscrit, notamment, où sont défini :

- les alliages Heuslers et leurs différents types.
- La classification des Heuslers.
- Les applications et leurs contributions qui peuvent être utilisés dans des technologies nouvelles.

### Référence :

- [1] J. Kübler, A. R. Williams, C. B. Sommers, Phys. Rev. **B 28**, 1745 (1983).
- [2] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, Angew. Chem. Int Ed **46**, 668 (2007).
- [3] S. Wurmehl, H. C. Kandpal, G. H. Fecher and C. Felser, J. Phys. Condens. Matter, **18**, 6171 (2006).
- [4] D. Jung, H. J. Koo, M. H. Whangbo, J. Mol. Struct:Theochem, **527**, 113 (2000).
- [5] J. Pierre, R. V. Skolozdra, J. Tobola, S. Kaprzyk, C. Hordequin, M. A. Kouacou, I. Karla, R. Currat, E. Lelievre-Berna, J. Alloys.Comp. **262**, 101 (1997).
- [6] J. H. Wernick, G. W. Hull, T. H. Geballe, J. E. Bernadini, J.V.Waszcak, Mater Lett. **2**, 90 (1983).
- [7] J. Winterlik, G. H. Fecher, A. Thomas, C. Felser, Phys. Rev. **B79**, 064508(1) (2009).
- [8] F. Heusler, Verh. DPG. **5**, 219 (1903).
- [9] H. Itoh, T. Nakamichi, Y. Yamaguchi, N. Kazama, Trans. Japan. Inst. Met. **24**, 265 (1983).
- [10] Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, U. Mizutani, Phys. Rev. Lett. **79**, 1909(1997).
- [11] H. Nakamura, Y. Kitaoka, K. Asayama, Y. Onuki, T. Komatsubara, J. Magn. Magn. Mater. **76**, 466 (1988).
- [12] J. Winterlik, G. H. Fecher, C. Felser, M. Jourdan, K. Grube, F. Hardy, H. von Lohneysen, K. L. Holman, R. J. Cava, Phys. Rev. **B78**, 184506 (1) (2008).
- [13] S. Sakurada, N. Shutoh, Appl. Phys. Lett. **86**, 082105 (1) (2005).
- [14] C. Uher, J. Yang, S. Hu, D. T. Morelli, G. P. Meisner, Phys. Rev. **B59**, 8615(1999).
- [15] D. Kieven, R. Klenk, S. Naghavi, C. Felser, T. Gruhn, Phys. Rev. **B81**, 075208(1) (2010).
- [16] S. Chadov, X. Qi, J. Kübler, G. H. Fecher, C. S. Felser, S. C. Zhang, Nat. Mat. **9**, 541 (2010).
- [17] H. Lin, A. Wray, Y. Xia, S. Xu, S. Jia, R. J. Cava, A. Bansil, M. Z. Hasan, Nat. Mater. **9**, 546 (2010).

- [18] F. Heusler, Über magnetische Manganlegierungen , Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. **12**, 219 (1903).
- [19] M. Bouchard, Electron metallography, magnetic properties Cu-Mn-Al heusler alloys, These de doctorat, London, (1970).
- [20] A. J. Bradley, J. W. Rodgers, The Crystal Structure of the Heusler Alloys, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 144 (852), 340, (1934).
- [21] H. Zenasni, Etude theorique des proprietes magnetiques, electronique et structurales des alliages de Heusler, Universite de Tlemcen (2013).
- [22] P. Gronberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. D. Brodsky, H. Sowers, Phys. Rev. Lett. **57**, 2442 (1986).
- [23] S. S. P. Parkin, N. More, K. P. Roche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2304 (1990).
- [24] N. F. Mott. , Proc. Phys. Soc. **47**, 571 (1935).
- [25] T. Graf, C. Felser, , S.S. Parkin, Simple rules for the understanding of Heusler compounds, Progress in solid state chemistry, **39**(1), **1** (2011).
- [26] F. Casper and al. , Half-Heusler compounds: novel materials for energy and spintronic applications, Semiconductor Science and Technology, **27**(6), 063001 (2012).
- [27] B. Nanda, and I. Dasgupta, Electronic structure and magnetism in doped semiconducting half-Heusler compounds, Journal of Physics: Condensed Matter, **17**(33), 5037 (2005).
- [28] T. NOURI, Étude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques du composé Heusler quaternaire TiZrRhAl : FP-LAPW, Université Dr. TAHAR MOULAY SAIDA, (2019).
- [29] R. A. De Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, , K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. **50**, 2024 (1983).
- [30] M. Pušelj ., Z. Ban, Ternäre phasen des typs MIVMIB (IIB) Hg<sub>2</sub>. Journal of the Less Common Metals, **42**(3), 279 (1975).
- [31] P.L.Yan, and al. , The structural, electronic, magnetic and mechanical properties of quaternary Heusler alloys ZrTiCrZ (Z= Al, Ga, In, Si, Ge, Sn): a first-principles study, Journal of Physics D: Applied Physics, **49**(25), 255002 (2016).
- [32] I. Galanakis, Springer Series in Materials Science, **30**, 4, (2016).

- [33] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *PhysRev* **B 66** (2002)134428.
- [34] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *PhysRev* **B 66** (2002) 174429.
- [35] W. Wang, H. Sukegawa, R. Shan, S. Mitani, and K. Inomata, **95** (2009) 182502.
- [36] M. Meinert, M. P. Geisler, J. Schmalhorst, U. Heinzmann, E. Arenholz, W. Hetaba, M. Stöger-Pollach, A. Hütten and G. Reiss, "Experimental realization of asemiconducting full-Heusler compound: Fe<sub>2</sub>TiSi", *Physical Review* **B 90**, 085127 (2014).
- [37] Chunsheng Liu, Claudia K. A. Mewes, Mairbek Chshiev, Tim Mewes, and William H. Butler, *Applied Physics Letters*, **95** (2009) 022509.
- [38] S. Mizukami, D. Watanabe, M. Oogane, Y. Ando, Y. Miura, M. Shirai, and T. Miyazaki, *Journal of Applied Physics*, **105** (2009) 07D306.

# Chapitre II

## Résultats et Discussions

### **i. Introduction :**

Les composés Heusler présentent une large gamme de propriétés d'intérêt technologique qui constituent une classe de matériaux importante pour l'utilisation dans les applications spintroniques [1-5], magnétorésistance géante (GMR) [6] et magnétorésistance tunnel [7]. La plupart de ces matériaux sont des demi-métalliques et magnétiques, en particulier le cas des ferromagnétiques d'où leur appellation par demi-métaux ferromagnétiques traduction de Half-Metallic Ferromagnets ou HMFs en abrégé [8-12]. Au cours des dernières années, de nouveaux domaines d'application sont apparus dans le domaine des énergies renouvelables, comme l'énergie solaire et la thermoélectricité. Actuellement, les composés Heusler sont également envisagés pour les technologies futures telles que l'ordinateur quantique.

Les alliages Heusler sont des systèmes ternaires de composition stœchiométrique avec une formule chimique  $X_2YZ$ . Dans cette classe, X et Y représentent des métaux de transitions, Z est soit un semi-conducteur de colonnes (III, IV et V) soit un composant non magnétique. Parmi ces composés, citons les Heuslers à base de Lithium  $Li_2XY$  (X=Pd, Ag, Cu) (Y=Sb, Te), qui possèdent des propriétés intéressantes notamment leur température de Curie relativement élevée.

Dans ce travail, Nous nous proposons de présenter une étude de leurs propriétés structurales et électroniques dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) en utilisant la méthode orbitale linéaire plein potentiel muffin-tin (FP-LMTO), celle-ci est implémentée dans le code de calcul LmtART [13].

### **ii. Méthode de calcul :**

Les différentes propriétés sont étudiées avec les méthodes de premiers principes [14] basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) [15].

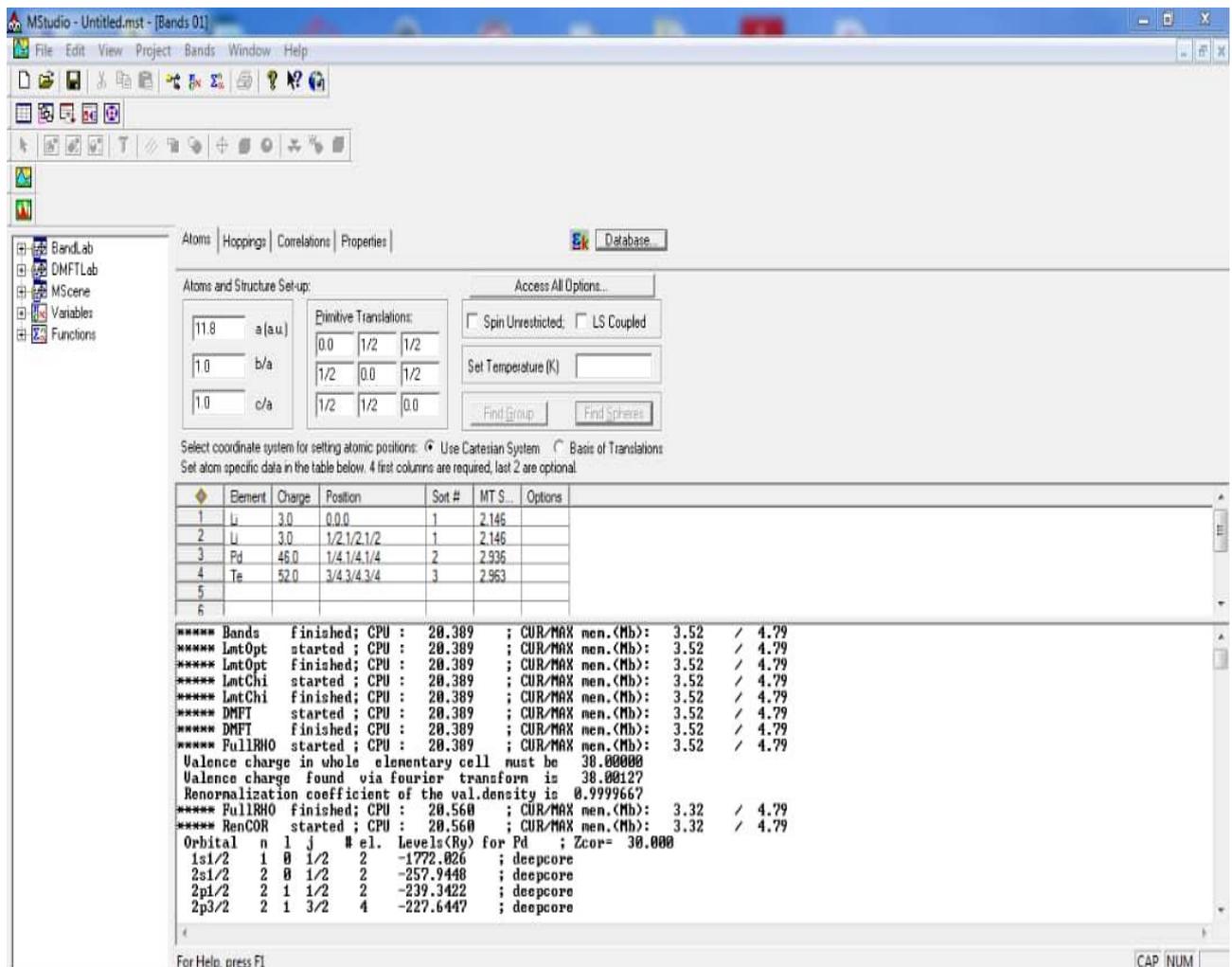
La DFT est une reformulation du problème quantique à N corps et comme son nom l'indique, c'est une théorie qui utilise uniquement la densité électronique [16].

Les calculs rapportés dans ce travail ont été effectués à l'aide de la méthode FP-LMTO qui est une implémentation spécifique de la DFT où l'approximation de la densité locale (LDA) a été appliquée comme déterminée par Perdew-Wang [17].

Dans cette méthode, il n'y a pas d'approximation de forme du potentiel cristallin, contrairement aux méthodes basées sur l'approximation des sphères atomiques (ASA) où le potentiel est supposé être symétrique sphérique autour de chaque atome. Pour plus de

commodité mathématique, le cristal est divisé en régions à l'intérieur de sphères de muffin-tin, où l'équation de Schrödinger est résolue numériquement.

Dans ce contexte, nous utilisons le code MstudioMindlab (Figure. II.1) qui est une implémentation de la méthode FP-LMTO pour le calcul des plusieurs propriétés en se basant sur la DFT, Le Mindlab est un logiciel scientifique pour les systèmes Windows qui effectue des calculs de structure électronique des solides[18], Le code Mindlab utilise des différentes bibliothèques ; la bibliothèque BandLab pour effectuer des calculs de l'énergie totale et la structure de bande et la bibliothèque MScene pour la visualisation des différentes propriétés calculées. Toutes ces bibliothèques sont liées entre elles d'une manière dynamique et forment MStudio.



**Figure. II.1:** La fenêtre de dialogue Mstudio-Mindlab

### iii. Résultats et discussion :

#### iii.1. Propriétés structurales :

Les propriétés structurales des matériaux étudiés sont nécessaires pour déterminer les paramètres structurales des matériaux en équilibre stable, qui sont les paramètres du réseau ( $a_0$ ), le module de compression  $B$  (GPa) et sa dérivés  $B'$ . Cette étude nous permet de prédire la phase du matériau la plus stable à travers les valeurs des énergies à l'état d'équilibre.

Les propriétés structurales ont été déterminées en ajustant la courbe de l'énergie totale en fonction du volume par l'équation de Murnaghan [19] :

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

$E_0$ : L'énergie d'équilibre.

$V_0$ : Le volume d'équilibre.

$B$  : Le module de compressibilité.

$B_0$ : La première dérivée du module de compressibilité.

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

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2}$$

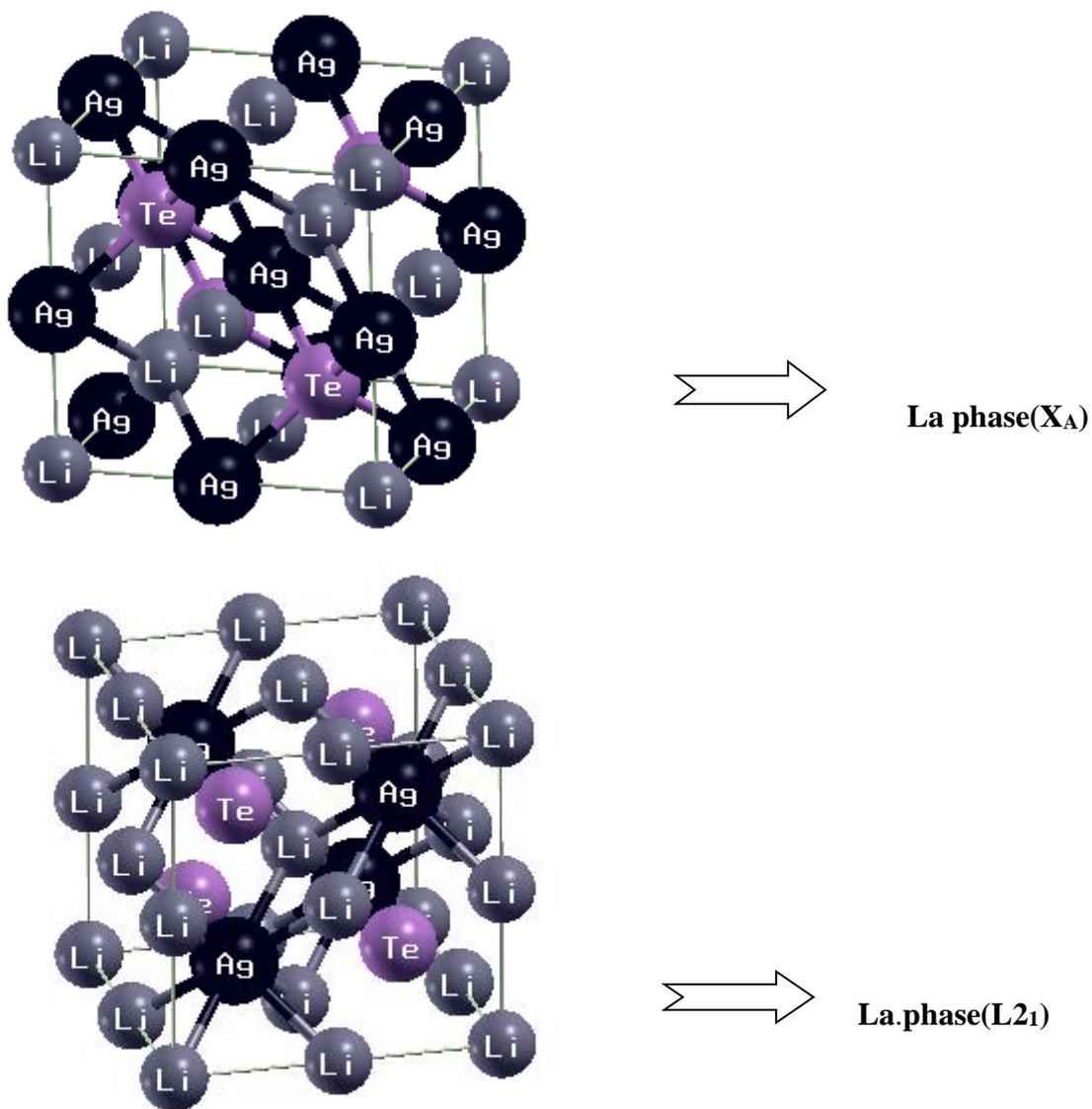
#### iii.1.a La stabilité structurale :

Nous avons effectué un calcul auto cohérent pour la détermination de l'énergie totale pour nos composés ternaire  $Li_2XY$  ( $X=Pd, Ag, Cu$ ) ( $Y=Sb, Te$ ) dans différentes structures données. Les résultats des propriétés structurales de ces matériaux : la constante du réseau  $a$ , le module de compressibilité  $B$ , sa première dérivée  $B'$  et sa structure dans les deux phases sont présentés dans les tableaux et les figures suivants :

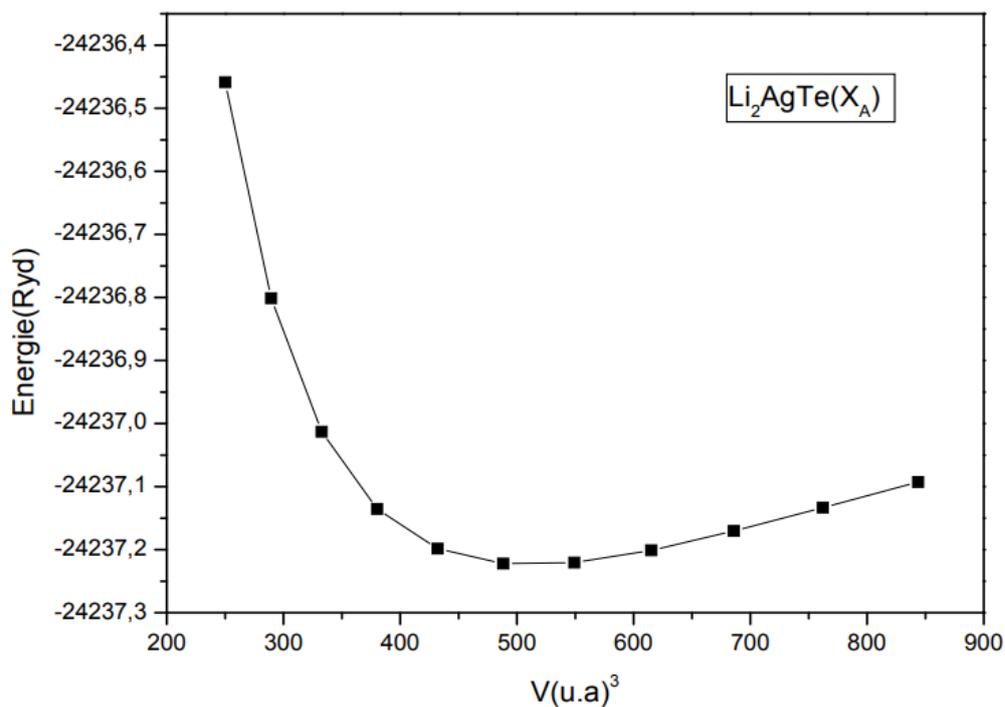
➤ **Li<sub>2</sub>AgTe :**

	Les phases	a(A°)	B(GPa)	B'
Li <sub>2</sub> AgTe	X <sub>A</sub>	6.753	41.454	3.9250
	L2 <sub>1</sub>	6.543	39.700	4.2160

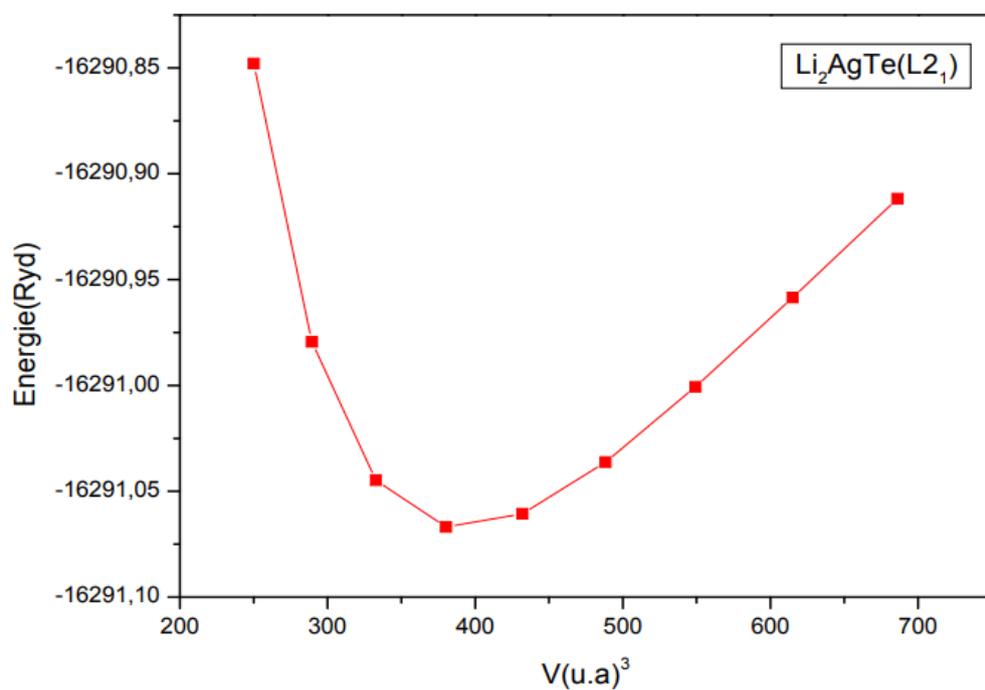
**Tableau. II.1:** Le paramètre du réseau (**a**), module de compressibilité (**B**), dérivée du module de compressibilité (**B'**) pour **Li<sub>2</sub>AgTe**.



**Figure. II.2 :** la structure de l'alliage **Li<sub>2</sub>AgTe** dans les deux phases.



**Figure II.3:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $X_A$ ).

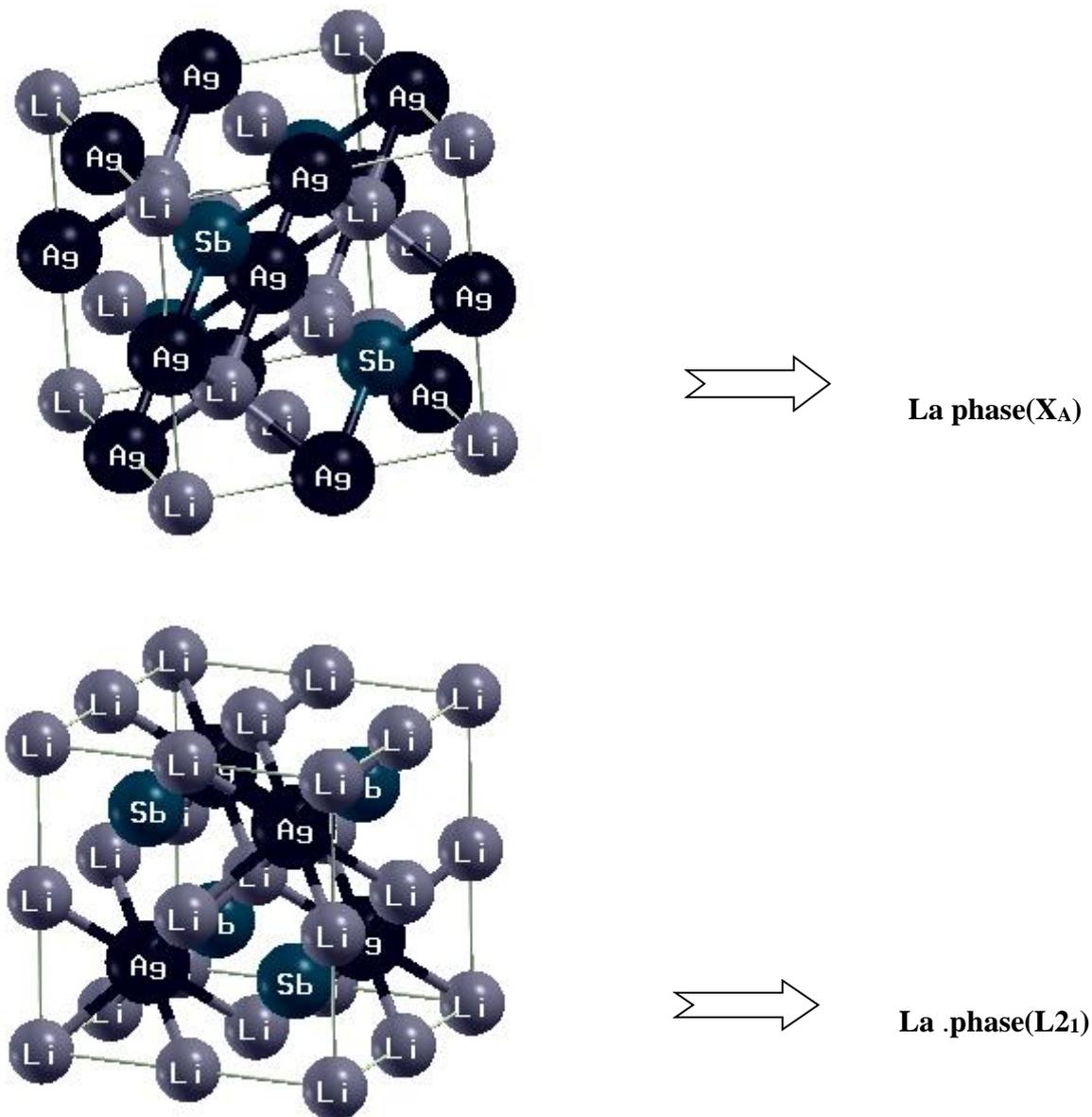


**Figure II.4:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $L2_1$ ).

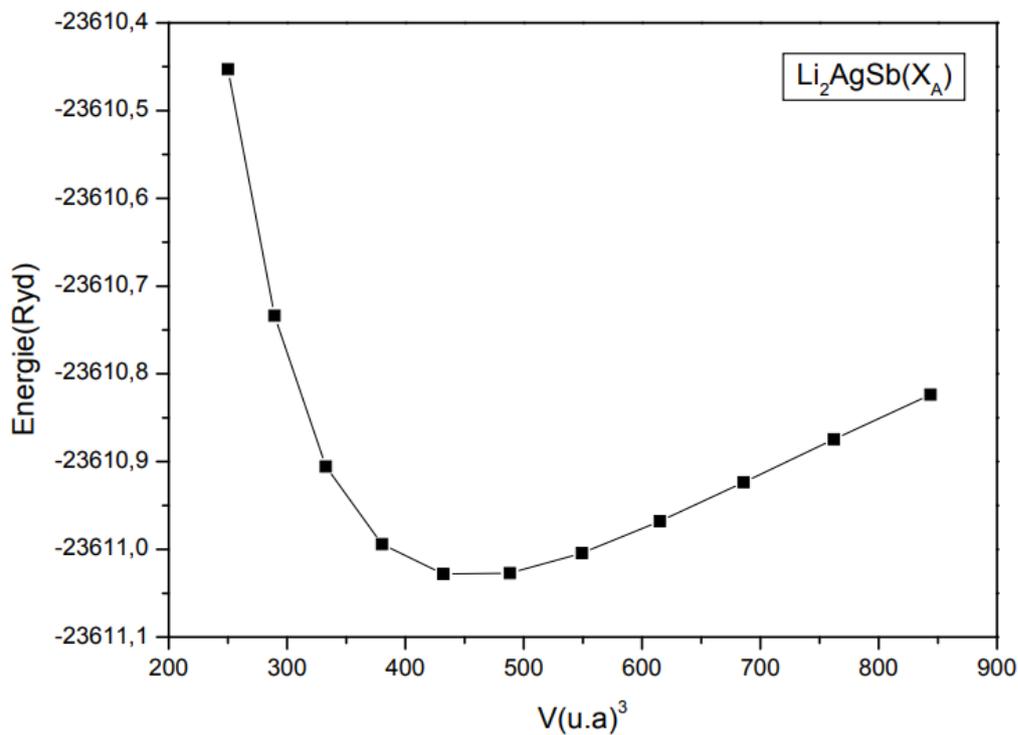
➤ **Li<sub>2</sub>AgSb :**

	Les phases	a(A°)	B(GPa)	B'
Li <sub>2</sub> AgSb	X <sub>A</sub>	7.130	47.920	4.4743
	L2 <sub>1</sub>	6.510	51.009	4.2032

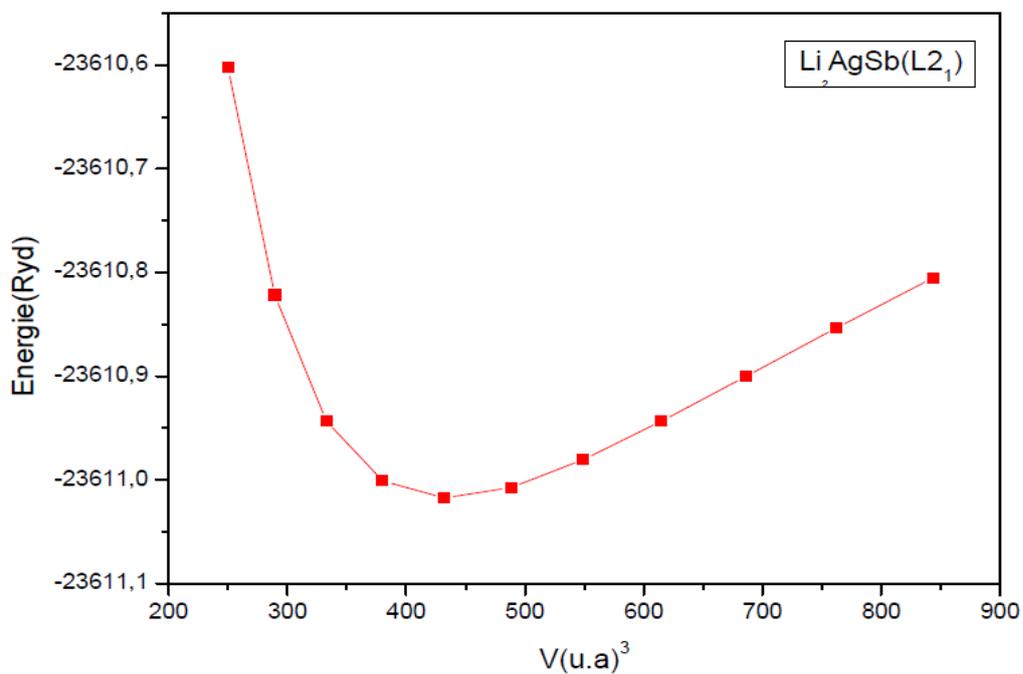
**Tableau .II.2:** Le paramètre du réseau (**a**), module de compressibilité (**B**), dérivée du module de compressibilité (**B'**) pour **Li<sub>2</sub>AgSb**.



**Figure. II.5:** La structure de l'alliage **Li<sub>2</sub>AgSb** dans les deux phases.



**Figure. II.6:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé **Li<sub>2</sub>AgSb** dans la phase (X<sub>A</sub>).

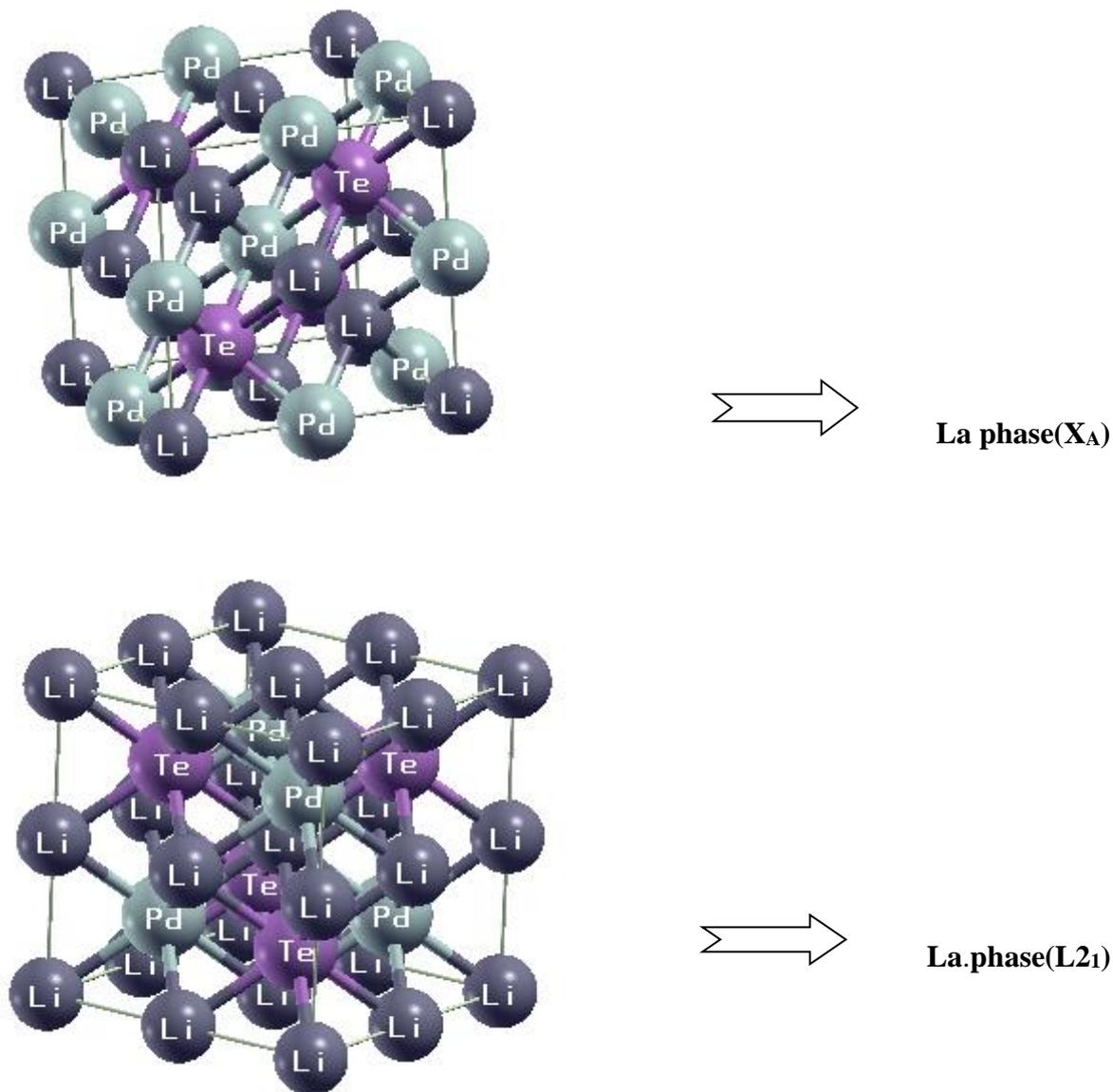


**Figure. II.7:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé **Li<sub>2</sub>AgSb** dans la phase (L2<sub>1</sub>).

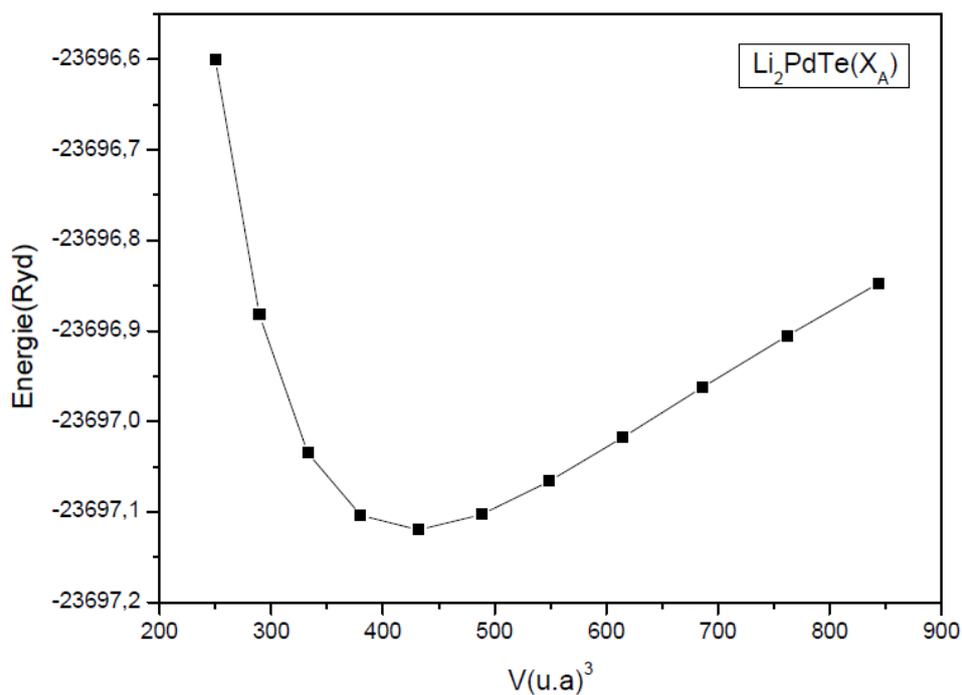
➤ **Li<sub>2</sub>PdTe** :

	Les phases	a(A°)	B(GPa)	B'
Li <sub>2</sub> PdTe	X <sub>A</sub>	6.240	55.860	4.8800
	L2 <sub>1</sub>	6.330	62.180	4.7486

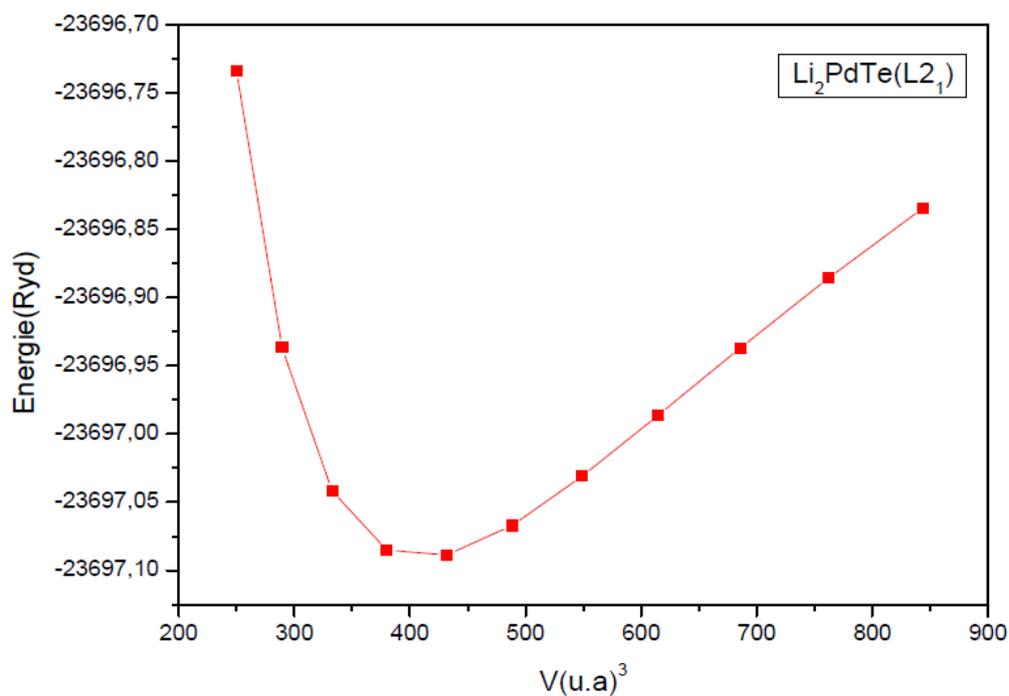
**Tableau. II.3:** Le paramètre du réseau (**a**), module de compressibilité (**B**), dérivée du module de compressibilité (**B'**) pour **Li<sub>2</sub>PdTe**.



**Figure. II.8:** La structure de l'alliage **Li<sub>2</sub>PdTe** dans les deux phases.



**Figure. II.9:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $X_A$ ).

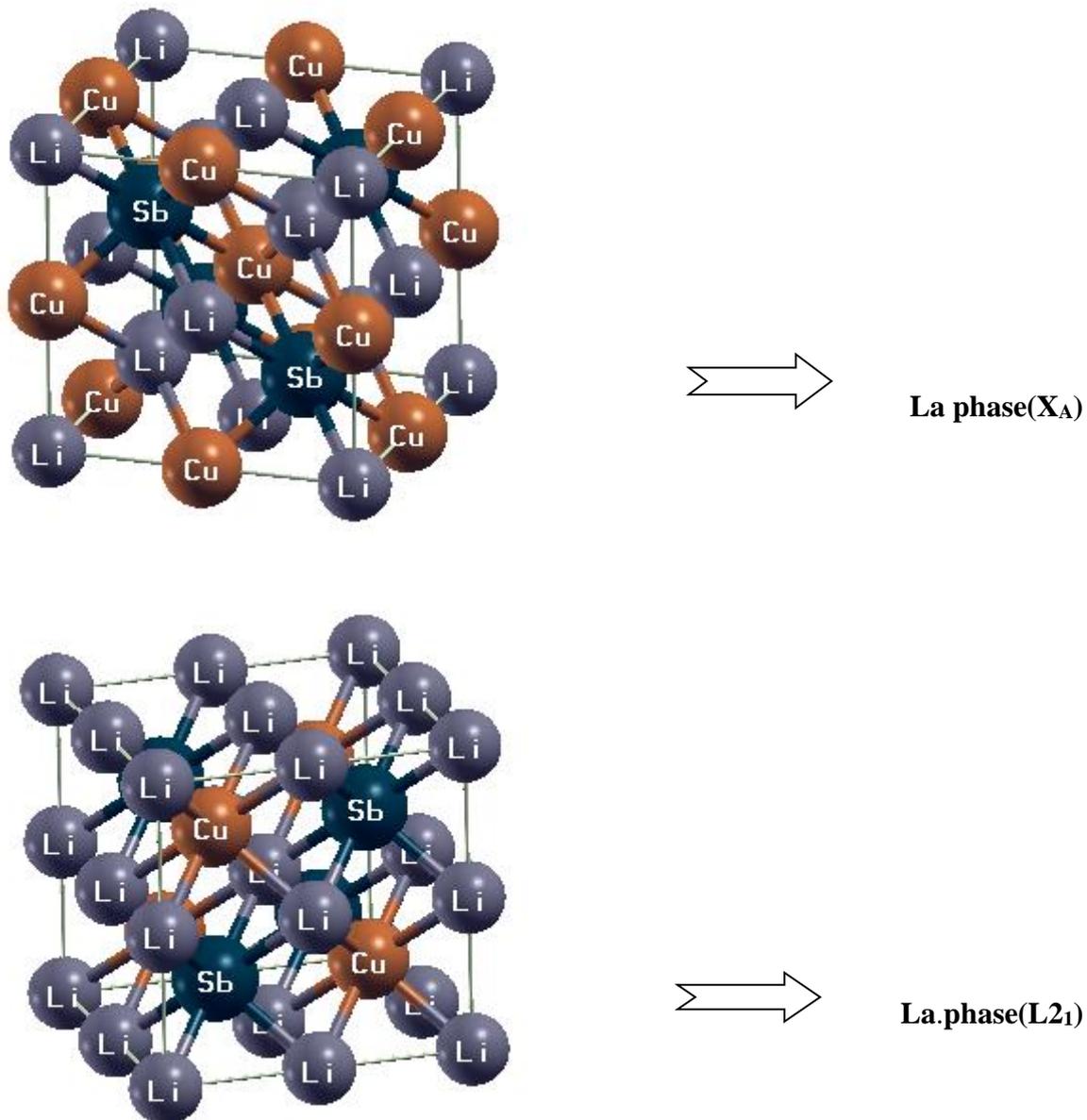


**Figure. II.10:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase ( $L2_I$ ).

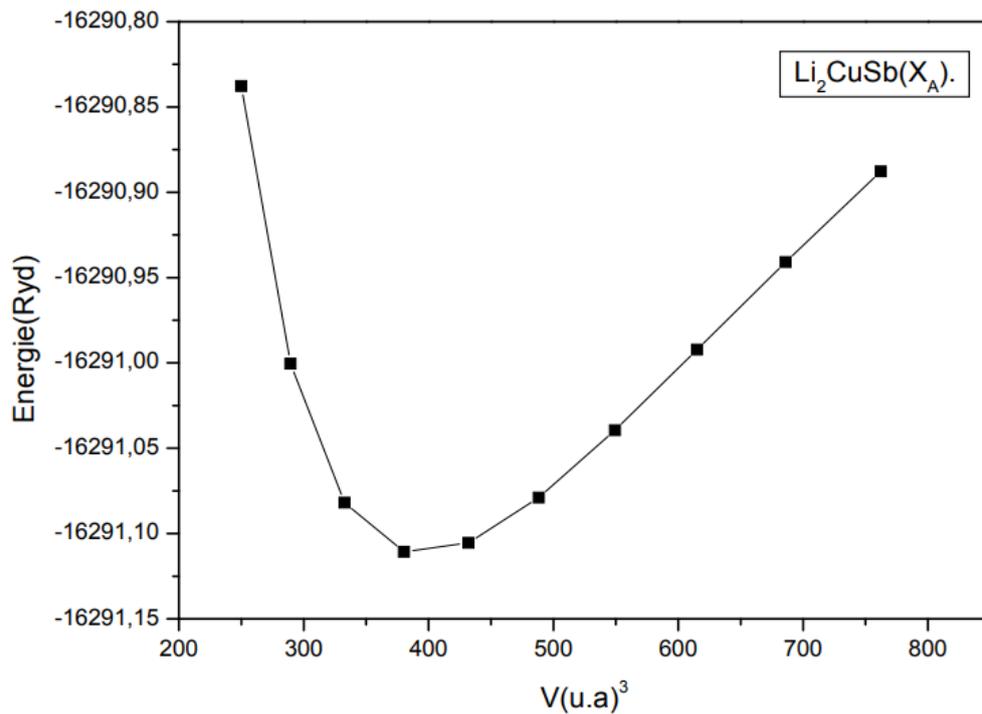
➤ **Li<sub>2</sub>CuSb** :

	Les phases	<b>a(A°)</b>	<b>B(GPa)</b>	<b>B'</b>
<b>Li<sub>2</sub>CuSb</b>	<b>X<sub>A</sub></b>	6.148	56.889	4.9370
	<b>L2<sub>1</sub></b>	6.140	51.156	4.5040

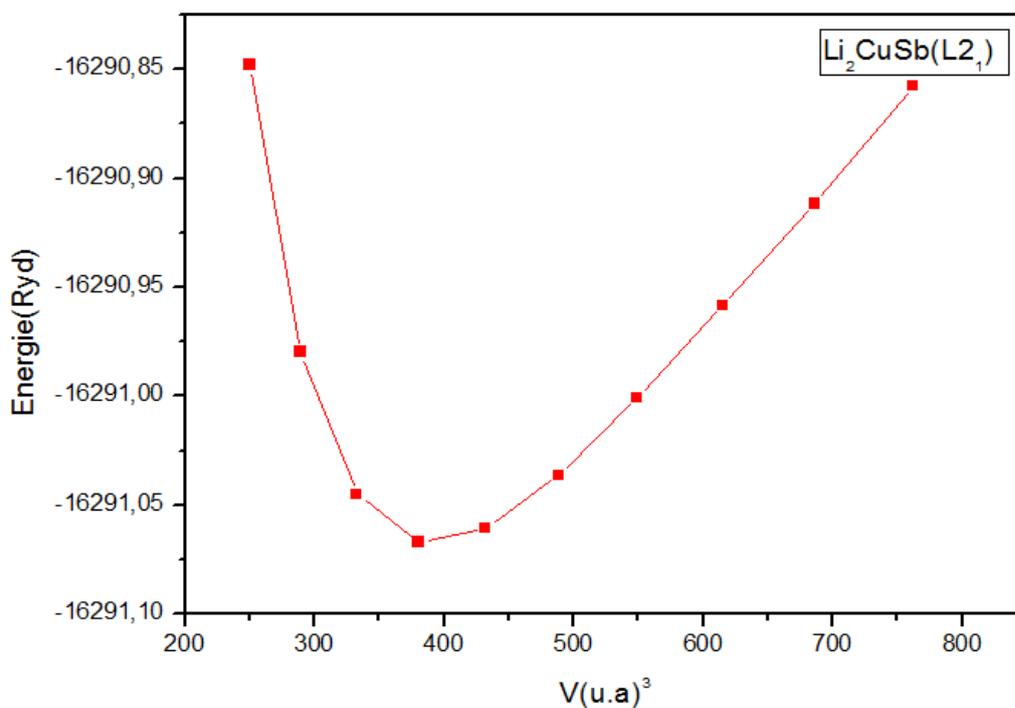
**Tableau. II.4** : Le paramètre du réseau (**a**), module de compressibilité (**B**), dérivée du module de compressibilité (**B'**) pour **Li<sub>2</sub>CuSb**.



**Figure. II.11**: La structure de l'alliage **Li<sub>2</sub>CuSb** dans les deux phases



**Figure. II.12:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $X_A$ ).



**Figure. II.13:** La variation de l'énergie en fonction du volume du composé  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $L2_1$ ).

## Chapitre II: Résultats et Discussion

En résumé, le tableau suivant récapitule tous les résultats obtenus:

<b>HEUSLER</b>	<b>Structure et Positions des atomes</b>	<b>a (u.a)</b>	<b>B(GPa)</b>	<b>B'</b>
$Li_2AgTe$	$L2_1 \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Ag(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Te(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.543</b>	<b>39.700</b>	<b>4.216</b>
$Li_2AgTe$	$X_A \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Ag(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Te(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.753</b>	<b>41.454</b>	<b>3.925</b>
$Li_2AgSb$	$L2_1 \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Ag(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Sb(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.510</b>	<b>51.009</b>	<b>4.2032</b>
$Li_2AgSb$	$X_A \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Ag(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Sb(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>7.130</b>	<b>47.920</b>	<b>4.4743</b>
$Li_2PdTe$	$L2_1 \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Pd(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Te(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.330</b>	<b>62.180</b>	<b>4.7486</b>
$Li_2PdTe$	$X_A \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Pd(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Te(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.240</b>	<b>55.860</b>	<b>4.8800</b>
$Li_2CuSb$	$L2_1 \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Cu(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Sb(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.140</b>	<b>51.156</b>	<b>4.5040</b>
$Li_2CuSb$	$X_A \left\{ \begin{array}{l} Li(0,0,0) \\ Li(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ Cu(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ Sb(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) \end{array} \right.$	<b>6.148</b>	<b>56.889</b>	<b>6.148</b>

Jusqu'à maintenant on s'est concentré que sur les deux phases dans les quelles ses alliages peut se cristallisés, on va voir l'influence du changement des positions atomique sur les propriétés électronique

### **iii.2.Propriétés électroniques:**

Les propriétés électroniques du solide dépendent essentiellement de la répartition des électrons dans les bandes de valence et de conduction, ainsi que de la valeur du gap, cette partie nous permet d'analyser la nature de nos alliages.

#### **iii.2.a. Structure de bandes d'énergie :**

En physique du solide, La relation de dispersion  $E(k)$  présente une propriété très importante. Les 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-LMTO, Les structures de bandes le long des directions de hautes symétries dans la zone de Brillouin pour les composés Heusler de base lithium  $Li_2XY(X=Pd, Ag, Cu)$  ( $Y=Sb, Te$ ) sont calculés aux paramètres de mailles d'équilibres et après les calculs dans les deux phases  $X_A$  et  $L2_1$  nous avons trouvé une déférence dans le gap d'énergie où il a été constate que la phase  $X_A$  montrent bien un comportement semi-conducteur et la phase  $L2_1$  est un comportement métallique alors le changement de la structure affecte les propriétés électroniques ceci est représentées dans les figures suivants :

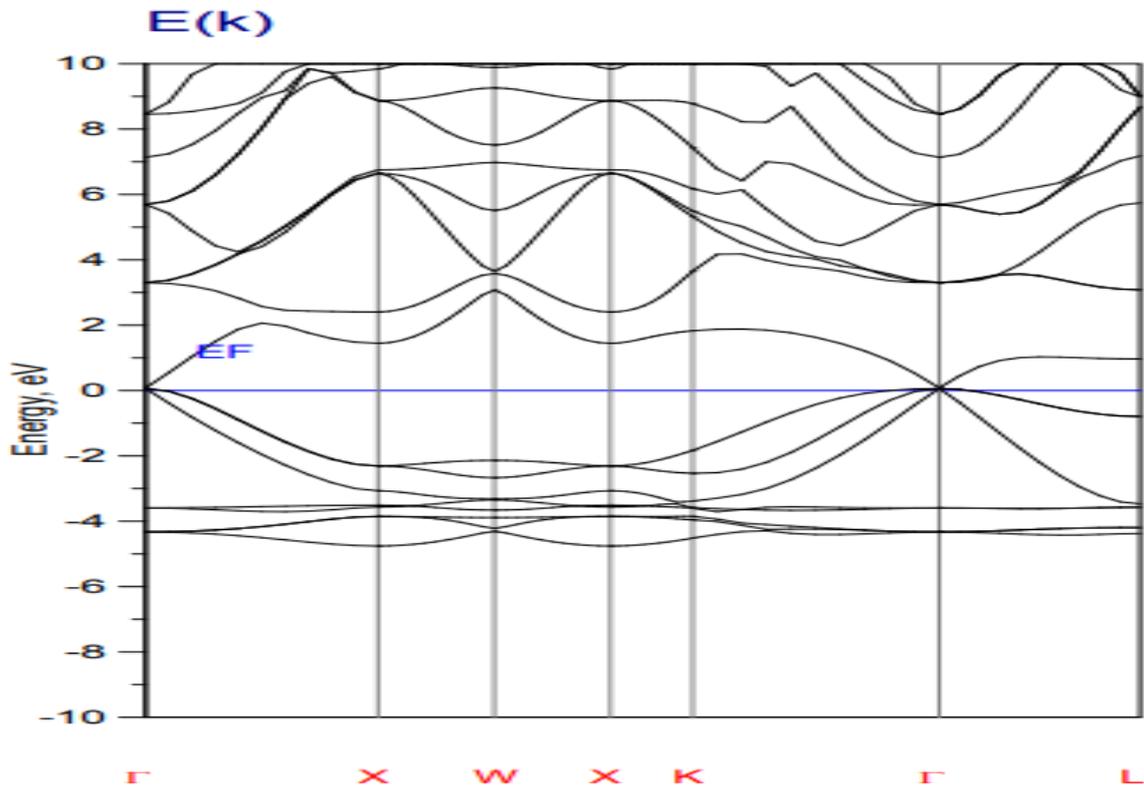


Figure. II.14: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $\text{X}_A$ ).

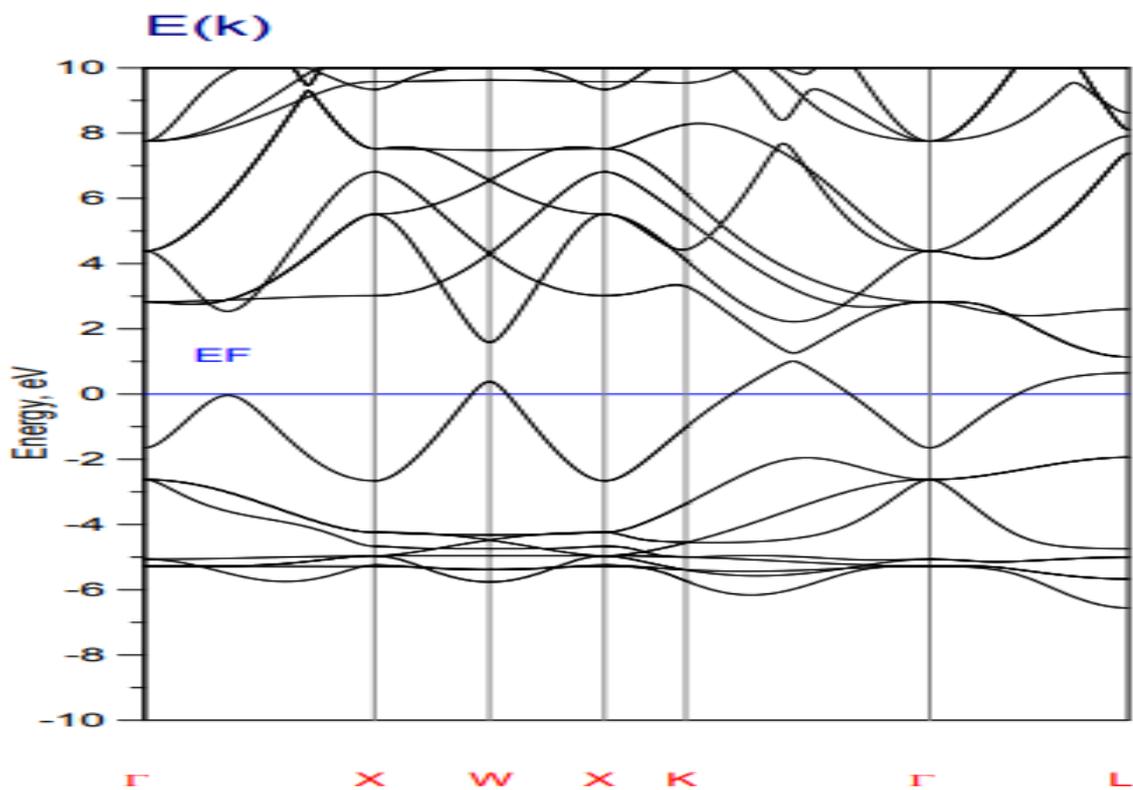


Figure. II.15: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgTe}$  dans la phase ( $\text{L}_{21}$ )

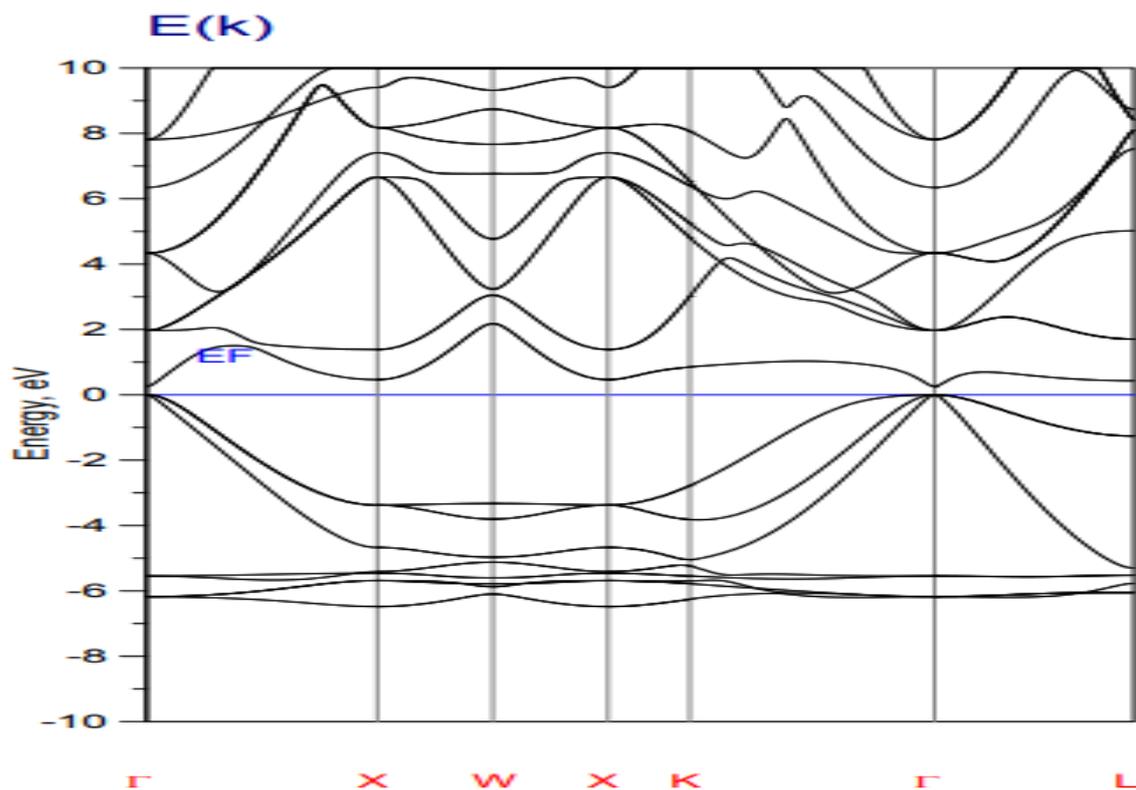


Figure. II.16: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase ( $X_A$ ).

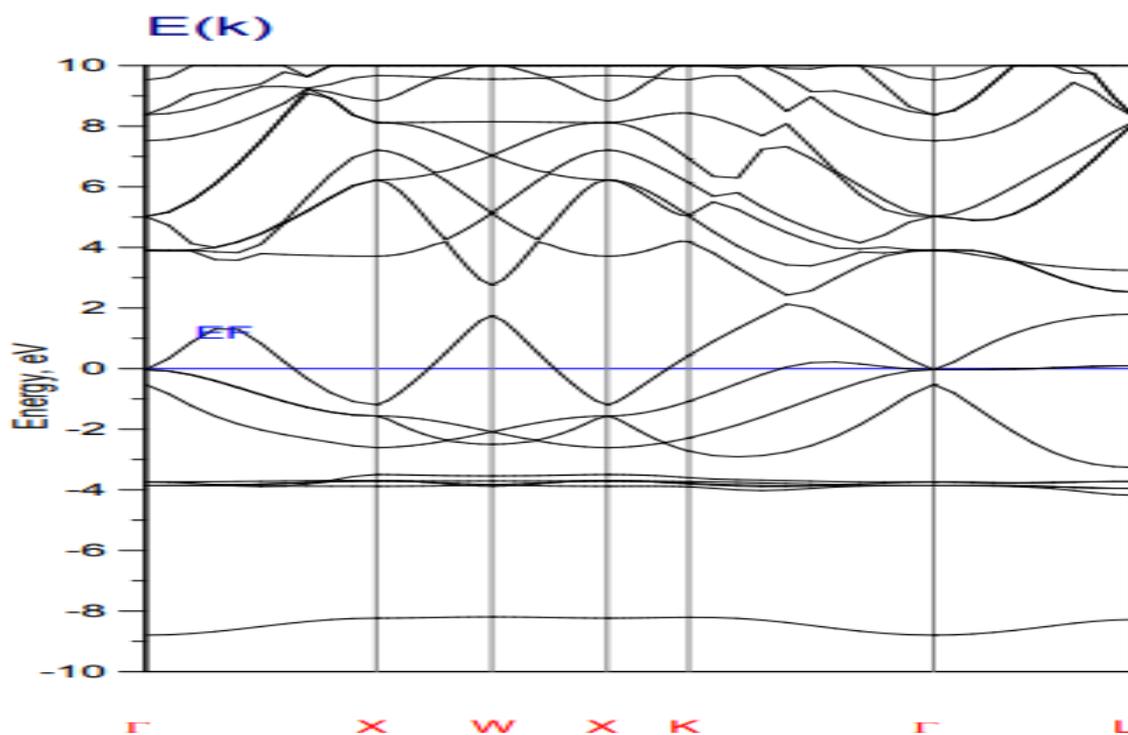


Figure. II.17: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{AgSb}$  dans la phase ( $L_{21}$ ).

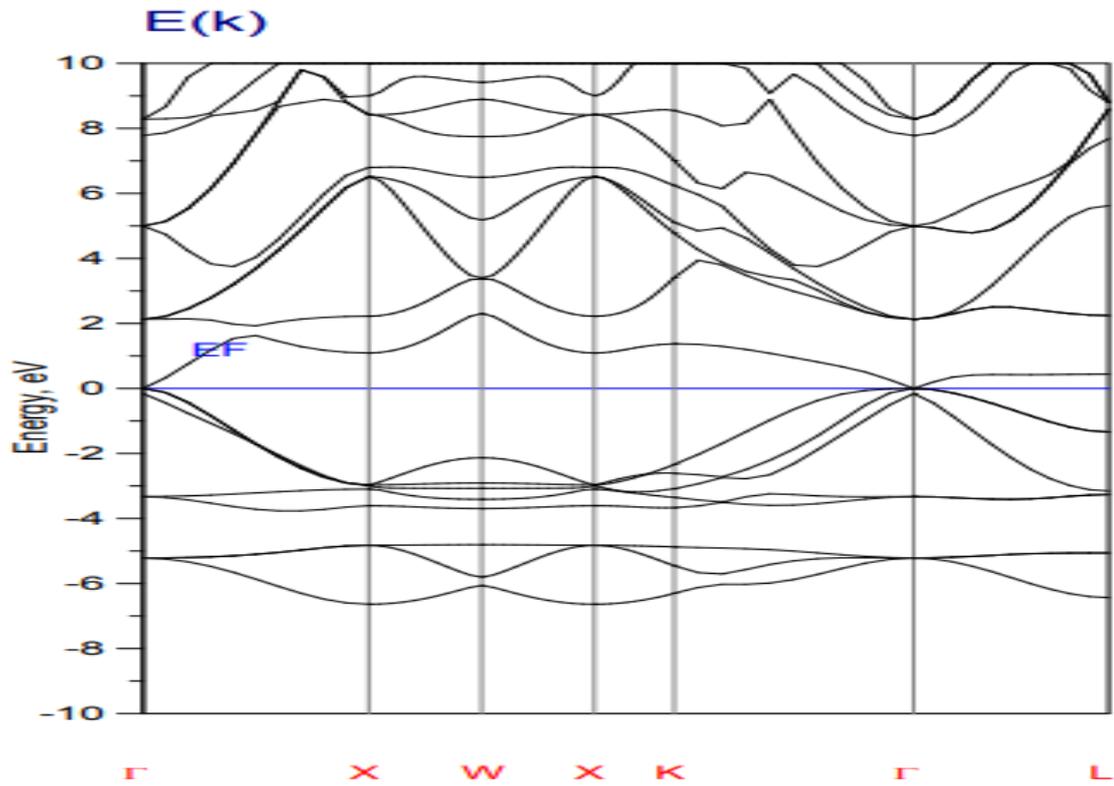


Figure. II.18: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase  $(X_A)$ .

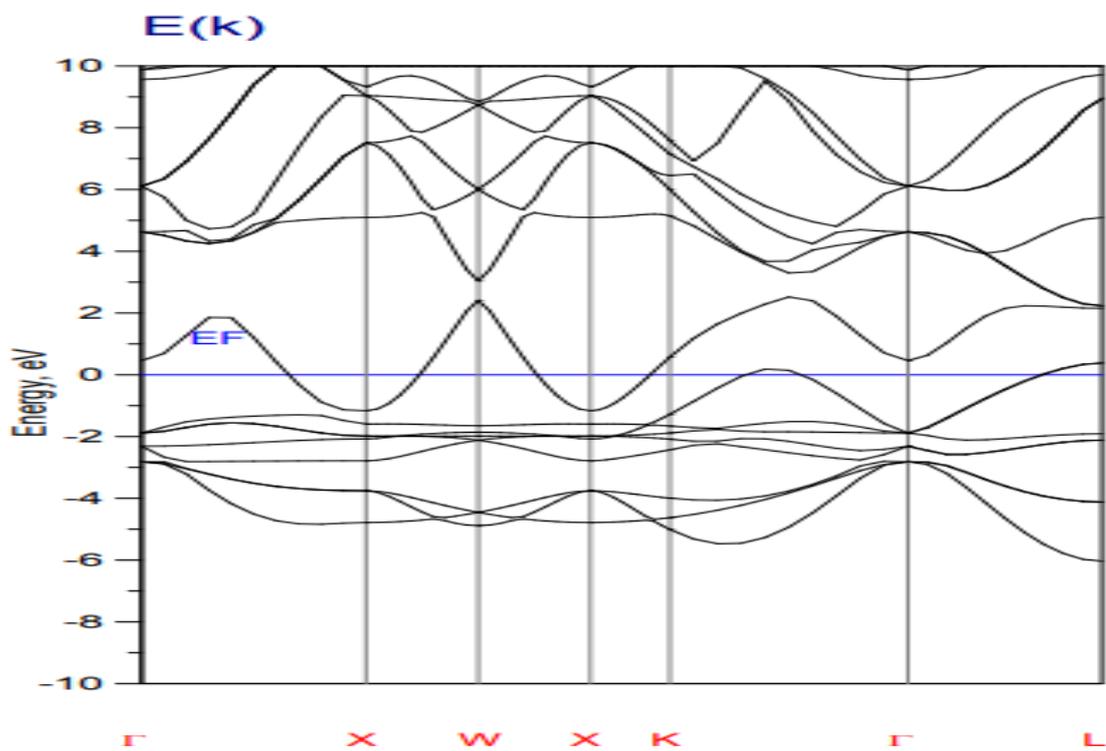


Figure. II.19: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{PdTe}$  dans la phase  $(L_{2i})$ .

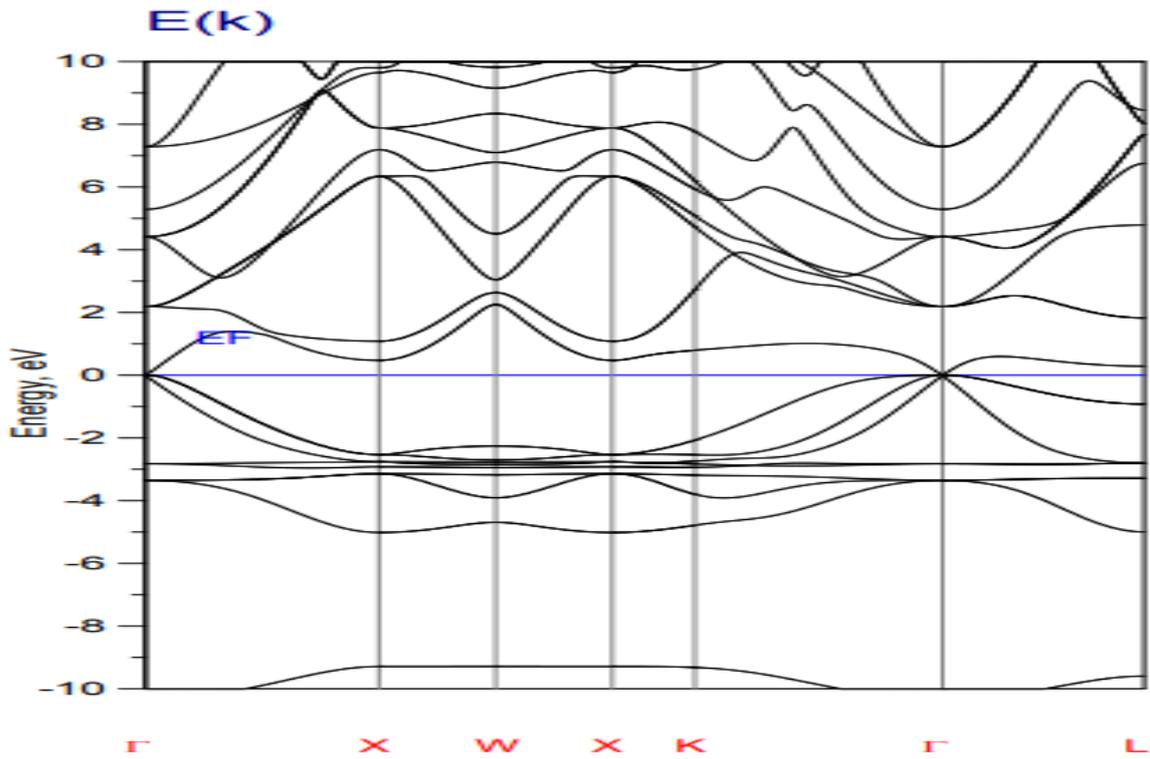


Figure. II.20: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $\text{X}_A$ ).

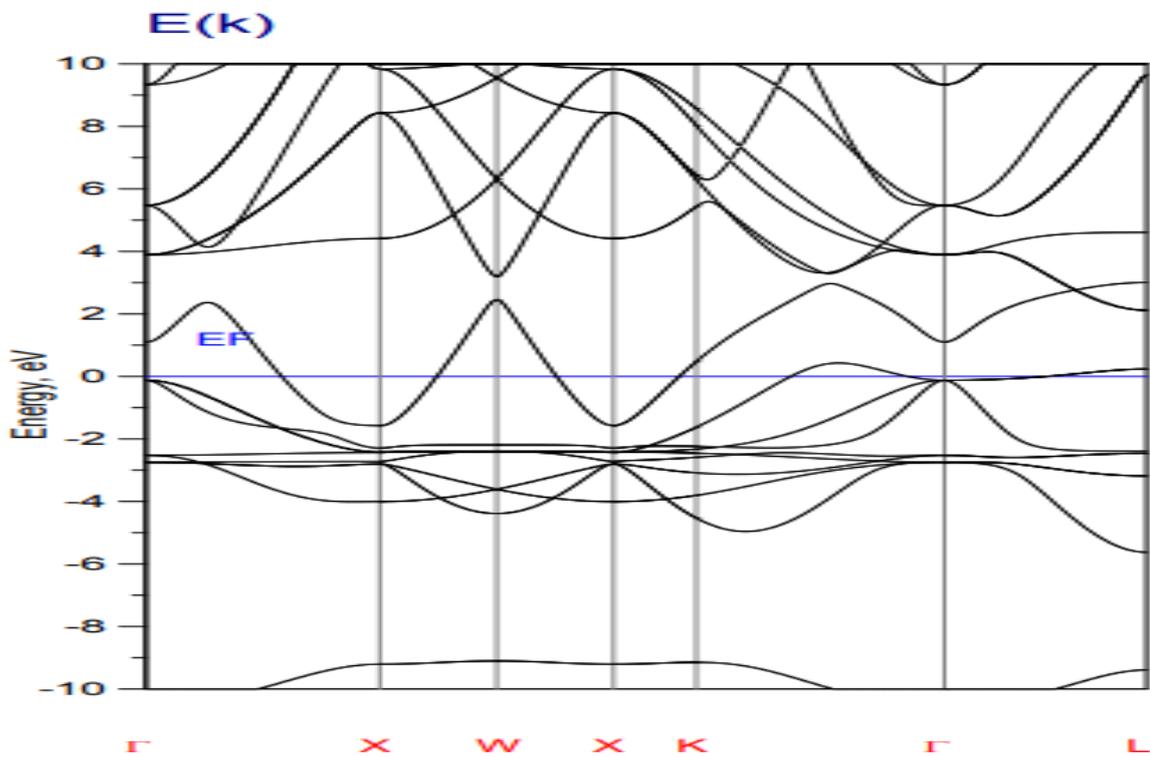


Figure. II.21: La Structure de bande électronique de  $\text{Li}_2\text{CuSb}$  dans la phase ( $\text{L}_{21}$ ).

## Chapitre II: Résultats et Discussion

---

Nous voyons clairement l'influence du changement des positions des atomes sur les propriétés électroniques, ceci est démontré par le comportement différent des composés, car dans la phase  $\mathbf{X}_A$  nos alliages se comporte comme des semiconducteurs par contre dans la phase  $\mathbf{L}_{21}$  on voit clairement le comportement métallique.

### Référence :

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. von Molnar, M.L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, *Science* **294** (2001) 1488.
- [2] G.A. Prinz, *Science* **282** (1998) 1660.
- [3] Y. Ohno, D.K. Young, B. Beshoten, F. Matsukura, H. Ohno, D. D. Awschalom, *Nature* **402**(1999) 790.
- [4] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, *Science* **287** (2000) 1019.
- [5] J.H. Park, E. Voscovo, H.J. Kim, C. Kwon, R. Ramesh, T. Venkatesh, *Nature* **392** (1998) 794.
- [6] B. Dieny, V.S. Speriosu, S.S.P. Parkin, B.A. Gurney, D.R. Wilhoit, D. Mauri, *Phys. Rev. B* **43**(1991) 1297.
- [7] Conductance and exchange coupling of two ferromagnets separated by a tunneling barrier J.C. Slonczewski, 1989.
- [8] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, L.W. Molenkamp, *Nature (London)* **402** (1999) 787.
- [9] J. Kübler, A.R. Williams, C.B. Sommers, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 1745.
- [10] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983) 2024.
- [11] F. Heusler, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **5** (1903) 219.
- [12] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **12** (1903) 220.
- [13] <http://www.physics.ucdavis.edu/~mindlab/MaterialResearch/Scientific/LmtART>.

[14] P.Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev, **136**, p. 864 (1964).

[15] J.P. Perdew, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J and C. Fiolhais, Phys. Rev, **B 46**, p. 6671(1992).

[16] M. A. Blanco, E. Francisco and V. Luaña, Comput. Phys Commun, **158**, p. 57 (2004).

[17] J.P. Perdew, Y. Wang, Phys. Rev. **B 46** (1992) 12947.

[18] W. H.Rippard and R. A.Buhrman,PhysRevLett **84**(2000) 971.

[19] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **30** (1944) 244.

**Conclusion générale**  
**et**  
**Perspectives**

## Conclusion générale :

Nous avons appliqué la méthode FP-LMTO (la méthode des orbitales muffin –tin linéarisées avec un potentiel total) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT implémentée dans le code Mstudio Mindlab et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation on a utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) pour étudier les propriétés structurales, électroniques et l'effet de la structure sur les propriétés électroniques du composé Heusler  $\text{Li}_2\text{XY}$  ( $\text{X}=\text{Ag}, \text{Cu}, \text{Pd}$ ) et ( $\text{Y}=\text{Sb}, \text{Te}$ ). Dans le but d'identifier les qualités de ces matériaux qui peuvent nous informer sur la possibilité d'être un bon candidat pour les applications spintroniques.

D'après notre calcul, les résultats obtenus sont comme suit :

- **Les propriétés Structurales :**

L'étape la plus importante est de déterminer les propriétés structurales d'un système donné dans son état fondamental qui montrent que nos matériaux sont plus stables dans la phase (XA), ce qui permet de déterminer les paramètres d'équilibre correspondants tels que la constante du réseau  $a_0$ , le volume  $V_0$ , le module de compressibilité  $B$  et sa première dérivé  $B'$ .

- **Les propriétés électroniques :**

Les résultats de la structure de bandes obtenus montrent bien un comportement métallique dans la phase L21 et un comportement semi-conducteur dans la phase XA. En générale, nous n'avons trouvé des valeurs comparatives qui font de nos calculs une prévision pour les travaux futures.

### **Perspectives :**

Notre travail mérite d'être un point de départ pour des études plus poussées et plus détaillées.

À cet égard, il peut être intéressant de poursuivre des investigations sur les points suivants :

- ✓ Réaliser des travaux expérimentaux afin de les comparer avec les résultats obtenus.
- ✓ Etudies d'autre type d'Heusler (Demi-Heusler, Heusler quaternaires ...) avec des même étapes.
- ✓ Etudier d'autres propriétés comme les propriétés élastiques, thermodynamiques et magnétiques.