

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Centre Universitaire de Tissemsilt

Institut des Sciences et Technologies

Département des Sciences de la Matière



Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

Master en Physique

Spécialité : Nano-Physique

Par

Lakhdar BENEDINE

Thème

Etude des propriétés structurales, électronique et demi-métallique des composés Heusler Co_2Fe (Ge, Si)

Soutenu le / /2020.

Devant le jury composé de :

Président : **Mr. Moukhtari Mohamed** MCA. Centre universitaire de Tissemsilt

Encadreur : **Mr. DAHMANE Fathallah** MCA. Centre universitaire de Tissemsilt

Examineur : **Mr. BOUMIA Lakhdar** MCA. Centre universitaire de Tissemsilt

Année universitaire 2019-20220

Résumé

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés structurales et électroniques des alliages Heusler Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) en utilisant le code Wien2K dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) par la méthode d'onde plane augmentée linéarisée (LAPW) basée sur le gradient d'approximation généralisé (GGA). Pour les deux composés, nous avons constaté que la phase directe (Cu_2MnAl) est plus stable que la phase inverse (Hg_2CuTi). Le calcul a également prouvé que le Co_2FeSi dans la phase Cu_2MnAl a un comportement demi-métallique.

Mots clés :

LAPW, DFT, GGA, propriétés structurales, propriétés électroniques, Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) ,
Heusler

Abstract

The aim of this work is to study the structural and electronic properties of the Heusler Co_2FeX alloy ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) using the Wien2K code within the framework of the functional theory (DFT) by the linearized augmented plane wave (LAPW) method based on the generalized gradient approximation (GGA). In both cases, we found that the forward phase (Cu_2MnAl) is more stable than the reverse phase (Hg_2CuTi). The calculation also proved that the Co_2FeSi in the Cu_2MnAl phase has semi-metallic behavior.

Keywords :

LAPW, DFT, GGA, structural properties, electronic properties, Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$), Heusler.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية لسبائك Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) ، باستخدام كود Wien2K في إطار النظرية الوظيفية (DFT) بواسطة الموجة المستوية المعززة الخطية (طريقة LAPW) على أساس تقريب التدرج المعمم (GGA). في كلتا الحالتين، وجدنا أن المرحلة الأمامية (Cu_2MnAl) أكثر استقرارًا من المرحلة العكسية (Hg_2CuTi). أثبت الحساب أيضًا أن Co_2FeSi في طور Cu_2MnAl له سلوك شبه معدني.

كلمات مفتاحية:

LAPW ، DFT ، GGA ، الخصائص الهيكلية ، الخصائص الإلكترونية ، Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) ، Heusler.

REMERCIEMENT

D'abord et avant tout, des louanges et des remerciements à ALLAH, le Tout-Puissant, pour ses douches de bénédictions tout au long de mon travail de recherche qui a été mené à bien.

Je tiens à exprimer ma profonde et sincère gratitude à mon superviseur, le Dr F. Dahmane, pour m'avoir donné l'opportunité de faire des recherches et de m'avoir fourni des conseils précieux tout au long de ce travail. Son dynamisme, sa vision, sa sincérité et sa motivation m'ont profondément inspiré. Il m'a appris la méthodologie pour mener à bien un travail scientifique et le présenter aussi clairement que possible, en indiquant fortement ses valeurs et son importance, pour être un chercheur indépendant performant dans le futur. Ce fut un grand privilège et un honneur de travailler et d'étudier sous sa direction.

Mes remerciements vont à tous les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer notre projet et surtout, à l'avance, pour leurs précieux critiques scientifiques et notes qui amélioreront sûrement le présent manuscrit.

Je remercie tous les enseignants qui m'ont enseigné et éduqué tout au long de ma carrière scolaire.

Je voudrais remercier du fond du cœur tous les membres de ma famille pour leur amour, leurs prières et leur soutien émotionnel.

Un merci spécial à tous mes amis en particulier, Hamid et Mustapha.

Enfin, mes remerciements vont à toutes les personnes qui m'ont soutenu, directement ou indirectement, pour mener à bien ce projet de master simple et innovant. J'espère que ce sera mon point de départ vers le plaisir de faire de la recherche, considérée comme le facteur clé du développement de toute société.

Lakhdar BENEDINE

List des figures

Fig. I.1 Le nombre des matériaux Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs.....	13
Fig. I.2 Structure cristallin ($C1_b$) de half Heusler.....	16
Fig. I.3. Structure cristallin type $L2_1$ de full Heusler.....	17
Fig. I.4. Structure cristalline d'Heusler (Full-Heusler) : a) régulière ; b) inverse.	18
Fig. I.5 Structure cristalline de quaternaire	19
Fig. I.6. Représentation schématique de la densité d'état pour un semi-métal, métal et semi-conducteur.....	21
Fig.I.7.Température de Curie T_c pour un ensemble d'alliages (a) Semi-Heusler et (b) Full Heusler.....	22
Fig. I. 8. Les deux états, parallèles et antiparallèles dans une jonction géante magnétique....	24
Fig. I .9. Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.....	25
Fig. II. 1. Structure cristalline de: (a) Co_2FeGe (Hg_2CuTi structure), (b) Co_2FeGe (Cu_2MnAl structure), (c) Co_2FeSi (Hg_2CuTi structure), (d) Co_2FeSi (Cu_2MnAl structure).....	31
Fig. II.2 La variation de l'énergie totale en fonction du volume deux structures (Hg_2CuTi et Cu_2MnAl) pour alliage Co_2FeGe	33
Fig. II.3 La variation de l'énergie totale en fonction du volume deux structures (Hg_2MnTi et Cu_2MnAl) pour alliage Co_2FeSi	34
Fig. II.4 Structures de bandes (spin up) de l'alliage Co_2FeGe (Hg_2CuTi).....	36
Fig. II.5 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage Co_2FeGe (Hg_2CuTi).....	37
Fig. II.6 Structures de bandes (spin up) de l'alliage Co_2FeGe (Cu_2MnAl).....	38
Fig. II.7 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage Co_2FeGe (Cu_2MnAl).....	39
Fig. II.8 Structures de bandes (spin up) de l'alliage Co_2FeSi (Hg_2CuTi).....	40
Fig. II.9 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage Co_2FeSi (Hg_2CuTi).....	41
Fig. II.10 Structures de bandes (spin up) de l'alliage Co_2FeSi (Cu_2MnAl).....	42
Fig. II.11 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage Co_2FeSi (Cu_2MnAl).....	43
Fig. II.12 La densité d'états électroniques du Co_2FeGe dans la structure Hg_2CuTi	45
Fig. II.13 La densité d'états électroniques du Co_2FeGe dans la structure Cu_2MnAl	45
Fig. II.14 La densité d'états électroniques du Co_2FeSi dans la structure Hg_2CuTi	46
Fig. II.15 La densité d'états électroniques du Co_2FeSi dans la structure Cu_2MnAl	46

List des tableaux

Tableau I.1 Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$	17
Tableau I.2 Les sites atomiques des combinées inéquivalentes des alliages quaternaire-Heusler.....	19
Tableau I.3 Les différents ordres de sites atomiques des alliages Heusler.....	20
Tableau II.1 présente paramètres de maille(a), le module de compression (B) et sa dérivé (B'), et la valeur d'énergie fondamentale E_0	32

Sommaire

Résumé	II
Remerciement	V
List des figures	VI
List des Tableaux	VII
Sommaire	VIII
Introduction général	10
Références	11
Chapitre I : Généralité sur les Heusler	
I.1.Introduction	13
I.2. Les alliages Heusler	14
I.2.1. Alliages Half-Heusler (semi-Heusler)	14
I.2.2. Alliages Full-Heusler	14
I.2.3. Alliages inverse Heusler	15
I.2.4. Alliages quaternaire Heusler	15
I.3. Propriétés des Heusler	15
I.3.1. Propriété Structurales	16
I.3.1.1. Structure cristalline des Half-Heusler	16
I.3.1.2. Structure cristalline du full Heusler	17
I.3.1.3 Structure cristalline du full Heusler inverse	18
I.3.1.4. Structure cristalline quaternaire Heusler	18
I.3.2. Propriétés électroniques	20
I.3.2.1 La demi-métallicité des alliages Heusler	20
I.4.La température de Curie	21
I.5. La spitronique	22
I.6. Les applications	23
I.6.1. Magnétorésistance Géante (GMR)	23
I.6.2. Magnétorésistance Tunnel (TMR)	24

I.7. Conclusion	25
Références	27
Chapitre II : Résultats et discussion	
II.1. Introduction	30
II.2. Détail de calcul	30
II.3. Structure cristalline des composés Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$)	30
II.3.1. Les positions des atomes de composé Co_2FeGe	30
II.4. Propriétés structurales	31
II.5. Les propriétés électroniques	35
II.5.1 La structure de bande d'alliage Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$)	35
II.5.1.1. Le composé Co_2FeGe	36
II.5.1.2. Le composé Co_2FeSi	40
II.5.2 La densité d'état (DOS) d'alliage Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$)	44
Références	48
Conclusion générale	49

Introduction générale

Les humains veulent toujours améliorer leur vie en créant de nouvelles technologies. La science des matériaux joue un rôle important dans ce long voyage d'amélioration de la vie et nous permet de déterminer les propriétés physiques et chimiques des systèmes atomiques, en se basant sur la loi naturelle qui affirme que la combinaison de deux matériaux différents ne présente pas une combinaison de leurs propriétés mais donne plutôt naissance à des caractéristiques nouvelles propres à l'alliage. Cela donne naissance à une nouvelle science qui est l'ingénierie des matériaux. Cette science est un élément important de la physique et de la chimie des matériaux. Le but de la science des matériaux est de déterminer les relations qui existent entre les structures (la façon dont les éléments constitutifs de la matière sont organisés) et les propriétés des matériaux, tandis que l'ingénierie des matériaux se concentre sur le développement et le développement des matériaux. Conception de matériaux avec des structures et des caractéristiques déjà connues. La physique des matériaux et la science intensive des matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans l'amélioration des applications technologiques, et ce rôle ne progressera que dans de nombreux domaines. Avant d'utiliser des matériaux (solides) dans l'industrie, il est nécessaire de s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques, mécaniques, etc. Comprendre les propriétés physiques de la matière nécessite des connaissances de base sur sa structure, sa stabilité et diverses propriétés structurales, électroniques et optiques.

Les Heusler sont l'un des matériaux les plus importants dans le domaine de la science des matériaux. En raison de leur énorme application dans le domaine du stockage d'informations [1]. Dans ce travail nous allons étudier l'alliage Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$). Nous avons divisé notre travail en deux chapitres.

- dans le premier chapitre, nous avons parlé des propriétés générales de tous les types d'alliages Heusler.
- dans le deuxième chapitre, nous avons étudié nos matériaux en utilisant le code wien2k [2] qui nous permet de déterminer les propriétés structurales et électroniques des matériaux.

Finalement nous terminons par une conclusion générale.

Références

[1] W. E. Pickett and J. S. Moodera, *Physics Today* 54 (2001) 39.

[2] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, *WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, Vienna University of technology, Vienna, Austria, 2001.

Chapitre I : généralités sur les alliages Heusler

I. 1.Introduction

Les alliages Heusler sont connus depuis plus de 100 ans [1]. En 1903 Fritz Heusler a découvert à son travail qu'un alliage contenant du cuivre, du manganèse et de l'aluminium de composition a sa formule chimique Cu_2MnAl se comporte comme un ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs ne soient pas magnétique [2,3]. Bradley et Rodgers a été déterminée sa structure cristalline en 1934 [4]. La figure I.1 montre un aperçu des combinaisons possibles des éléments qui peuvent former ces matériaux.

X_2YZ Heusler compounds

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

Fig. I. 1. Le nombre des matériaux Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs [5].

Les alliages Heusler sont des composés ternaires de formule chimique générale X_2YZ qui peuvent agir comme semi-métaux, semi-conducteurs et supraconducteurs, où X et Y sont des

métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V du tableau périodique. Il est divisé en deux grandes familles selon leur formule chimique.

- Les Half-Heusler (semi-Heusler) dont la formule générale est XYZ.
- Les Full-Heusler dont la formule générale s'écrit X_2YZ [6].

Étonnamment, les propriétés de nombreux composés Heusler peuvent être prédites en comptant simplement le nombre d'électrons de valence [7]. Par exemple, les composés Heusler non-magnétiques avec environ 27 électrons de valence sont supraconducteurs [8].

Les Semi-conducteurs comportent une autre sous-catégorie importante avec plus de 250 combinaisons, ils sont considérés comme des nouveaux matériaux pour les technologies de l'énergie. Leurs largeurs de bande peuvent être facilement variées de 0 à 4 eV en modifiant simplement leur composition chimique. Ainsi, ils ont attiré l'attention en tant que candidats potentiels pour les applications des cellules solaires et des applications thermoélectriques à la fois [9].

La grande classe de composés X_2YZ magnétiques montre tous les types de comportement magnétique et propriétés magnétiques multifonctionnelles, telles que les caractéristiques magnéto-optiques, magnétocaloriques et magnéto-structurales. Les alliages Heusler ont continuellement attiré l'intérêt en raison de leurs températures de Curie élevées [6].

I.2. Les alliages Heusler

I.2.1. Alliages Half-Heusler (semi-Heusler)

Les alliages half-Heusler sont défini par une formule générale XYZ, avec une stœchiométrie (1, 1, 1), ces alliages constitués en deux partie ; une partie covalente et une autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct et Z peut être considéré comme l'équivalent anionique. Les éléments X et Y peuvent être des métaux de transition ou des éléments des terres rares et Z est l'élément le plus électronégatif comme le Ge, Sn, Sb [10].

I.2.2. Alliages Full-Heusler

Les alliages full-Heusler sont défini par une formule générale X_2YZ , avec une stœchiométrie (2, 1, 1). Où X et Y sont des métaux de transition comme Co, Cu, Ni, et Y est souvent Mn ou Fe, et Z est un semi-conducteur ou élément non magnétique comme le Si, Ge. L'élément qui répète

deux fois (X) est mis au début de la formule, tandis que l'élément (Z) du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique est placé à fin, par exemple Co_2MnSi , Fe_2VAl .

Au passé, les alliages Heusler ont souvent été compris comme alliages intermétalliques, bien que la description comme un composé intermétallique soit plus appropriée en raison de leur caractéristique d'ordre atomique [11].

I.2.3. Alliages inverse Heusler

Les Alliages Heusler sont basés sur un critère de stabilité des positions atomiques occupés par les éléments X et Y. Dans le cas où le numéro atomique de l'élément Y est plus élevé que le numéro atomique de X, c'est-à-dire, $Z(Y) > Z(X)$ sur la même période, nous obtiendrons des alliages Inverse-Heusler de composition (2, 1, 1) de prototype Hg_2CuTi [12].

I.2.4. Alliages quaternaire Heusler

Il existe une autre famille pour les alliages d'Heusler. Connue comme un cas de composés Heusler quaternaire. Dans ce cas il existe quatre atomes de nature différente. En remplaçant l'un des atomes X dans la stœchiométrie X_2YZ par un autre atome X' avec une formule chimique générale connue par $XX'YZ$ et de stœchiométrie (1, 1, 1, 1). Où X, X', et Y sont des métaux de transition et Z est un élément sp. La valence de site X' est inférieure à la valence des atomes X, et la valence de Y est inférieure à la valence des deux atomes X et X' [13].

Plusieurs alliages Heusler quaternaires ont été prédits comme des matériaux demi-métalliques tels que CoFeMnSi [14].

I.3. Propriétés des Heusler

Comme tous les matériaux, les Heusler ont des propriétés différentes comme structurales, électroniques, mécanique et optiques. Dans cette section, nous allons en parler en détail.

I.3.1. Propriété Structural

Parce que nous avons différents types des Heusler donc chacun a ses propriétés structurales. Ils sont classés en quatre familles en fonction de leur structure cristalline. Nous allons commencer par les propriétés structurelles du half-Heusler.

I.3.1.1. Structure cristalline des Half-Heusler

Les alliages half-Heusler se cristallisent dans une structure cubique non-Centro-symétrique (groupe spatial numéro 216, $F-43m$, $C1_b$). Dont un prototype est $MgAgAs$ qui peut être dérivée de la structure tétraédrique de type ZnS par un remplissage des sites octaédriques du réseau.

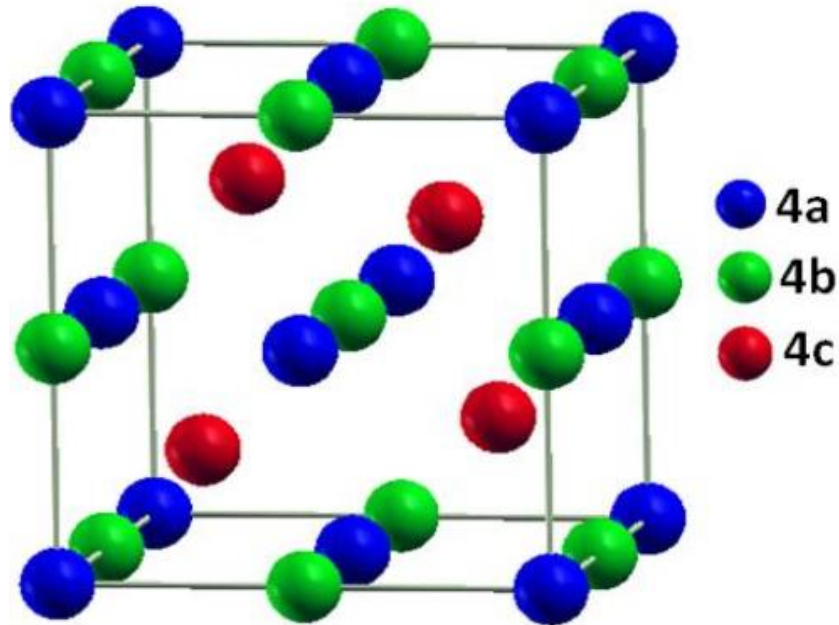


Fig. I. 2. Structure cristallin ($C1_b$) de half Heusler [15].

Ce type de structure semi-Heusler peut être caractérisé par l'interpénétration diagonale de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), chacun est occupée par les atomes X, Y et Z. Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4) [10]. Autre mot, en a trois arrangements atomiques non équivalents sont possibles dans ce type de structure telle que résumés dans le tableau suivant.

Tableau I.1 Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$ [12].

Elément	X	Y	Z
Type 1	4a (0,0 ,0)	4b (1/2,1/2,1/2)	4c (1/4,1/4,1/4)
Type 2	4b (1/2,1/2,1/2)	4c (1/4,1/4,1/4)	4a (0,0 ,0)
Type 3	4c (1/4,1/4,1/4)	4a (0,0 ,0)	4b (1/2,1/2,1/2)

I.3.1.2. Structure cristalline des full Heusler

Les alliages full-Heusler de composition (2, 1, 1) se cristallise dans la structure cubique à face centré de type Cu_2MnAl ($L2_1$, groupe d'espace $Fm-3m$, N°225). Sou forme quatre cube à face centrée qui s'interpénètrent en diagonal. L'atome X occupe la position A (0, 0, 0) et B (1/2, 1/2, 1/2), Y occupe la position C (1/4, 1/4, 1/4) et Z prend la position D (3/4, 3/4, 3/4) [13].

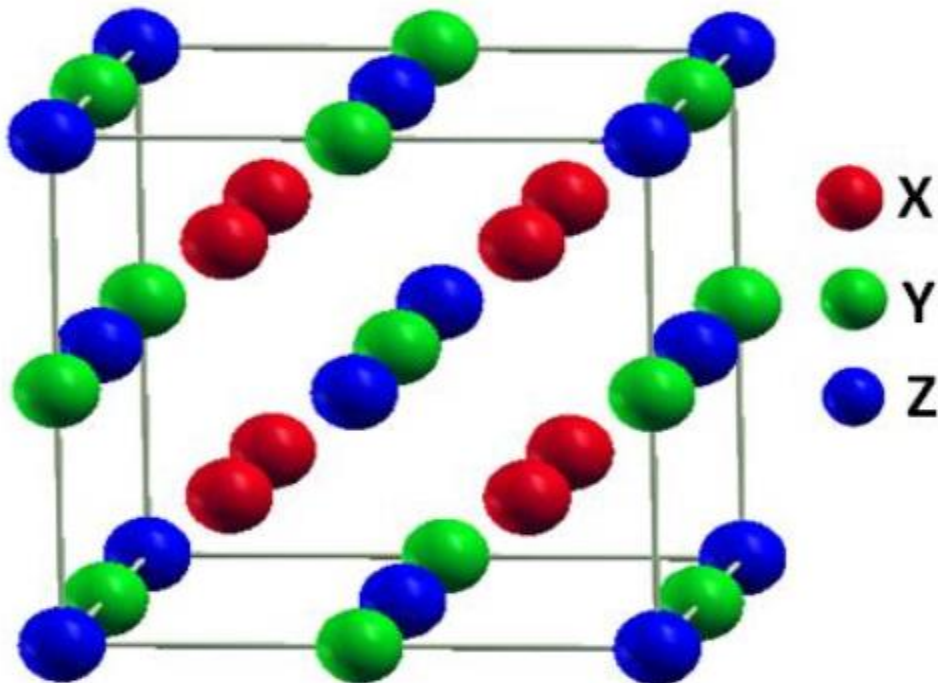


Fig. I.3. Structure cristallin type $L2_1$ de full Heusler [15].

I.3.1.3 Structure cristalline du full Heusler inverse

La structure d'alliage inverse full Heusler est de type Hg_2CuTi , Alors, l'atome X occupe la position A (0, 0, 0) et la position B ($1/4, 1/4, 1/4$) l'atome Y occupe la position C ($1/2, 1/2, 1/2$) et Z occupe la position D ($3/4, 3/4, 3/4$), de groupe d'espace ($F43m$, groupe d'espace no. 216). La figure (I.4) présente les structures cristallines de l'alliage full Heusler de deux types [16].

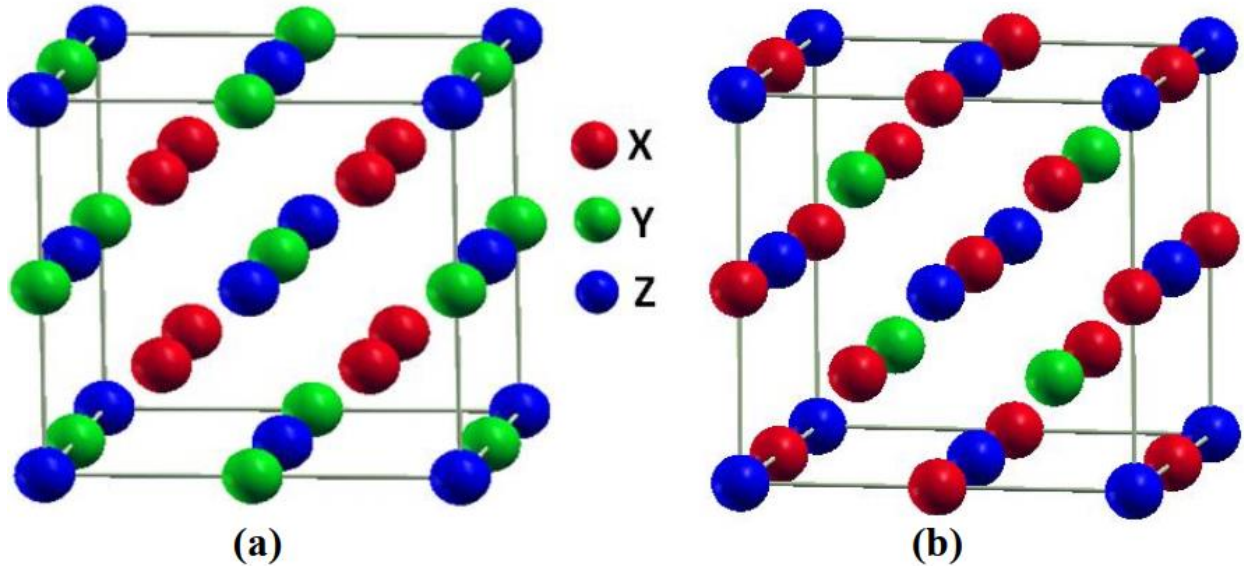


Fig. I.4. Structure cristalline d'Heusler (Full-Heusler) : a) régulière ;
b) inverse.[15]

I.3.1.4. Structure cristalline quaternaire Heusler

Lorsque les alliages Heusler ternaires de composition (2, 1, 1) où leurs éléments X seront partiellement substitués par X', génèrent d'autres alliages quaternaire-Heusler de formule chimique $XX'YZ$, qui cristallisent dans la phase cubique type-LiMgPdSn avec une composition (1, 1, 1, 1) (Y, groupe d'espace $F-3m$, N°216) [14].

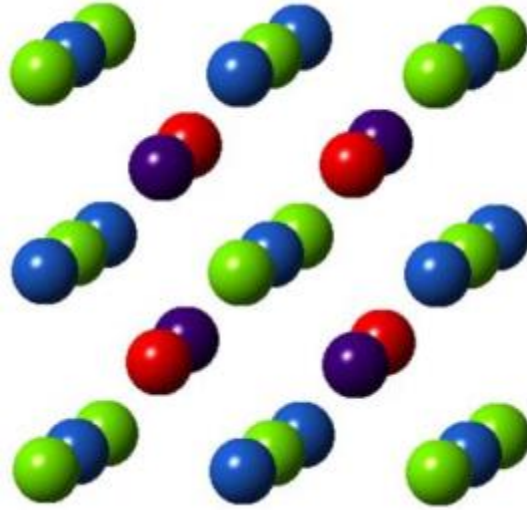


Fig. I.5 Structure cristalline de quaternaire [15].

Les éléments X, X', Y, Z occupent les positions atomiques 4c ($1/4, 1/4, 1/4$), 4d ($3/4, 3/4, 3/4$), 4b ($1/2, 1/2, 1/2$), 4a ($0, 0, 0$) respectivement [17]. Voici un tableau qui présente les trois combinées inéquivalentes des alliages quaternaire-Heusler.

Tableau I.2 Les sites atomiques des combinées inéquivalentes des alliages quaternaire-Heusler.

Elément	X	X'	Y	Z
Type 1	4c ($1/4, 1/4, 1/4$)	4d ($3/4, 3/4, 3/4$)	4b ($1/2, 1/2, 1/2$)	4a ($0, 0, 0$)
Type 2	4b ($1/2, 1/2, 1/2$)	4d ($3/4, 3/4, 3/4$)	4c ($1/4, 1/4, 1/4$)	4a ($0, 0, 0$)
Type 3	4a ($0, 0, 0$)	4d ($3/4, 3/4, 3/4$)	4b ($1/2, 1/2, 1/2$)	4c ($1/4, 1/4, 1/4$)

Tableau I.3 Les différents ordres de sites atomiques des alliages Heusler

Alliages	Les sites atomiques	Formule chimique	Type de structure	Groupe d'espaces
Half-Heusler	X, Y, Z	XYZ	MgAgAs	C1b, (F-43m, N°216)
Full-Heusler	X=X, Y, Z	X ₂ YZ	Cu ₂ MnAl	L21, (Fm-3m, N°225)
Inverse Heusler	X=X, Y, Z	X ₂ YZ	Hg ₂ CuTi	X, (F-43m, N°216)
Quaternaire Heusler	X, X', Y, Z	XYZ	LiMgPdSn	Y, (F-3m, N°216)

I.3.2. Propriété électronique

On peut connaître les propriétés électroniques des Heusler en l'étudiant la structure des bandes et la DOS de nos matériaux, Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible de comprendre et d'expliquer schématiquement les différents comportements entre un isolant, un semi-conducteur, un conducteur et un métal où un demi-métal.

I.3.2.1 La demi-métallicité des alliages Heusler

Le concept de demi-métal ferromagnétique ont découvert par Groot et Al au début des années 1980, qui s'intéressant le calcul au structure de bande d'alliage semi-Heusler de forme (NiMnSb) [17].

Les matériaux ferromagnétiques défini par la densité d'état électronique ($N(E_F)$) au niveau de Fermi pour les électrons de spin majoritaires (up ; $N\uparrow(E_F)$) et de spin minoritaires (down ; $N\downarrow(E_F)$). L'expression suivant présente la polarisation en spin qui mesure l'asymétrie en spin donner par :

$$P = \frac{N\uparrow(E_F) - N\downarrow(E_F)}{N\uparrow(E_F) + N\downarrow(E_F)} \quad (1.01)$$

La fonctionnalité ferromagnétisme demi-métallique présente l'asymétrie entre les états des spins up et les spins down au niveau de Fermi, cette asymétrie résulte la différent des propriétés électroniques entre les spins majoritaires (up) et les spins minoritaires (down).

Plus précisément, la demi-métallicité s'agit d'un état de la matière où certains matériaux comme les composés d'Heusler montrent des propriétés métalliques pour une direction de spin soit ils présentent des semi-conducteur au même isolante dans l'autre orientation de spin (voir la figure I.6).

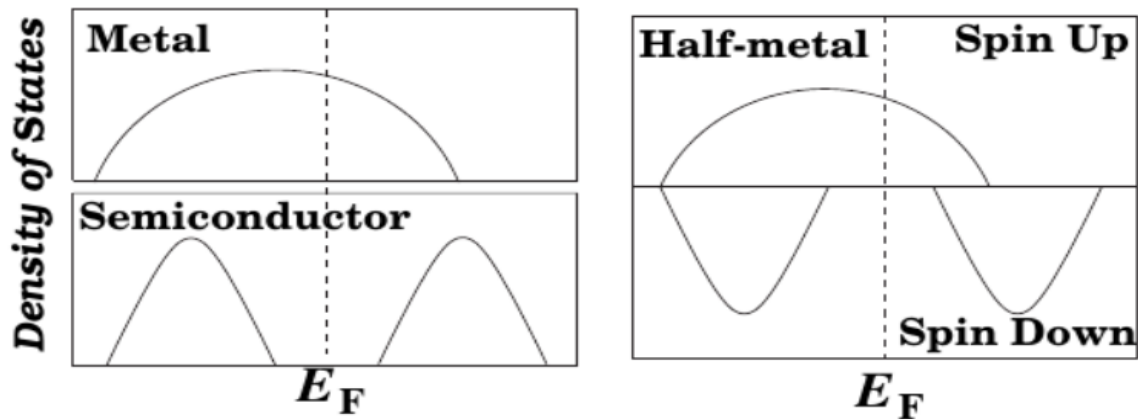


Fig. I.6. Représentation schématique de la densité d'état pour un semi-métal, métal et un semi-conducteur [18].

I.4. La température de Curie

Un point crucial dans le développement de matériaux semi-métallique magnétique est leur température de Curie T_c . Comparés aux semi-conducteur magnétique dilués (DMS), il est plus courant de trouver des alliages Heusler avec des températures de Curie supérieures à l'ambiante. Toutefois, il reste indispensable de prendre en compte ce facteur lors de développement de nouvelles compositions, il est en effet clair que T_c dépend fortement de la composition. La figure (I.7) présente les valeurs de la température de Curie pour une sélection des matériaux avec : (a) une structure Semi-Heusler et (b) une structure Full-Heusler. Nous pouvons y distinguer très nettement le Co_2FeAl avec une valeur de T_c proche de $1200 \text{ }^0 \text{ k}$, plus importante que celles de l'ensemble des autres matériaux représentés.

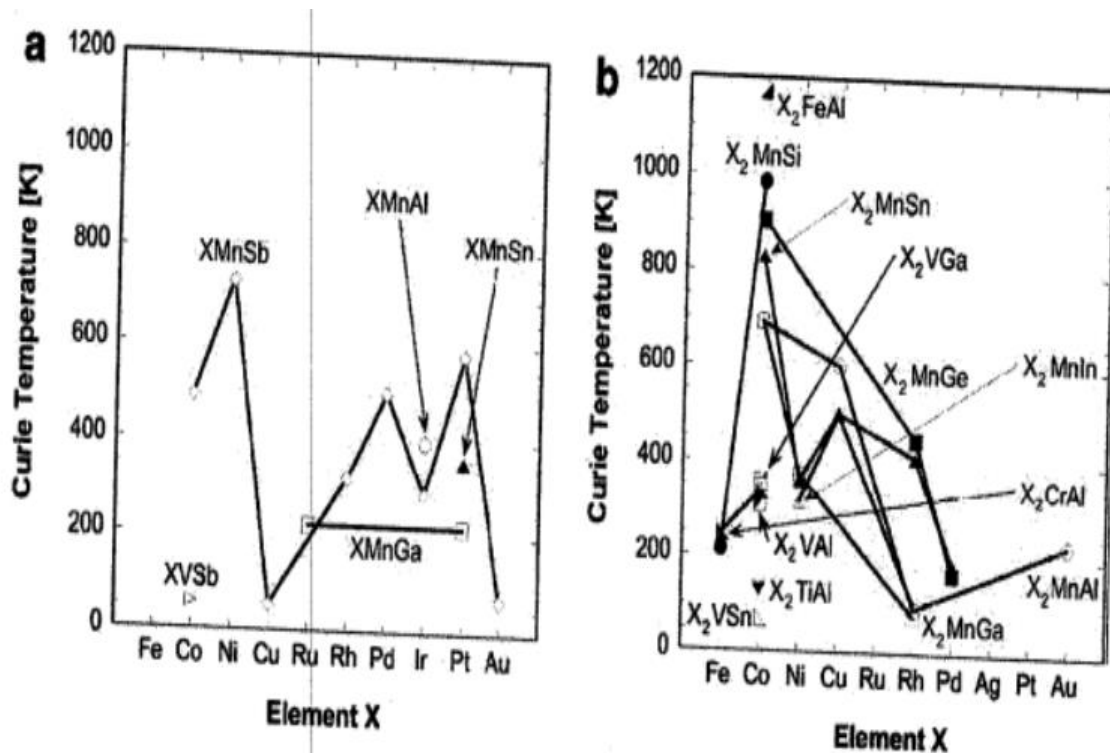


Fig. I.7. Température de Curie T_c pour un ensemble d'alliages (a) Semi-Heusler et (b) Full Heusler [19].

I.5. La spintronique

Spin Electronics est né en 1988, année de la découverte de la magnétorésistance géante par les équipes d'Albert Fert [20,21] en France et de Peter Grunberg [22] en Allemagne, et pour laquelle le prix Nobel de physique 2007 Il est important de venir retour sur cette découverte, qui fut la première utilisation de la polarisation de spin des électrons dans le cadre de l'électronique, c'est-à-dire du transport de charges. Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le chemin des électrons et d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, suggérée pour la première fois par Mott en 1936, a ensuite été démontrée expérimentalement et décrite théoriquement au fil des ans.

I.6. Les applications

La découverte de l'effet de magnétorésistance géante (GMR) dans les multicouches et sandwichs magnétique en 1986 par l'équipes Peter Grünberg [23] et Albert Fert [24] a révolutionné le domaine de la technologie de l'information.

Le principe général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'étudier l'influence de spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott en 1936 [25].

Pour cette découverte, ils ont reçu le prix Nobel de Physique en 2007. Aujourd'hui, la spintronique possède des applications importantes les plus répandues étant la lecture des disques dure par la magnétorésistance géante(GMR) et magnétorésistance tunnel (TMR) et l'écriture des mémoires magnétique (MRAM) dans les ordinateurs.

I.6.1. Magnétorésistance Géante (GMR)

La GMR est un effet quantique qui observé dans un empilement de type Ferro/Métal/Ferro. Elle se manifeste comme une différence de résistance électrique entre une configuration où les aimantations des couches Ferromagnétiques sont parallèles, et une configuration où les aimantations sont antiparallèles. Le rapport de magnétorésistance MR est donné par la relation suivante

$$MR = \frac{R_{\uparrow\downarrow} - R_{\uparrow\uparrow}}{R_{\uparrow\uparrow}} \quad (1.02)$$

Où $R_{\uparrow\downarrow}$ et $R_{\uparrow\uparrow}$ sont la résistivité pour la configuration antiparallèle et la configuration parallèle respectivement [7].

Ces systèmes se composent d'un empilement de deux couches minces ferromagnétiques séparées par une couche conductrice non-magnétique. Les matériaux les plus couramment utilisés pour les électrodes ferromagnétiques sont le Fer, le Cobalt et leurs alliages, tandis que le cuivre et le chrome sont utilisés pour la couche non-magnétique [26,27].



Fig. I. 8. Les deux états, parallèles et antiparallèles dans une jonction géante magnétique

I.6.2. Magnétorésistance Tunnel (TMR)

La magnétorésistance à effet tunnel est une propriété dérivant strictement de la mécanique quantique et elle est similaire à la magnétorésistance géante. Les premières observations de cet effet ont été faites en 1975 par Julliere [7], ce n'est qu'à partir de 1995, assisté par les travaux de Moodera et al sur des empilements $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{CoFe}$, que la TMR a connu un regain d'intérêt. La TMR a une structure semblable à celle des vannes de spin mais, à la différence que la couche séparatrice est une fine couche de matériau isolant appelée barrière tunnel (par exemple en alumine d'épaisseur 1,5 nm) et donc il peut être observé dans les systèmes Ferro/Isolant/Ferro. Le passage du courant se fait par effet tunnel à travers cette barrière et pour qu'il soit possible l'épaisseur de cette ne doit pas excéder 1 à 2 nanomètre



Fig. I. 9. Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.

Des travaux récents ont montré qu'en utilisant des matériaux Heusler comme des électrodes dans des MTJ (jonctions magnétiques tunnels) [28, 29, 30], permettent d'atteindre des valeurs élevées de TMR. La magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel, sont les premières manifestations de la spintronique. Cette découverte a entraîné un bouleversement technologique majeur dans le domaine de la microinformatique. Cela se reflète évidemment dans le développement de nouvelles architectures de têtes de lecture de disque dur moderne basées sur ce principe qui ont permis d'accroître la densité des disques durs des ordinateurs ce qui augmente leurs capacités de manière immense pouvant atteindre le Téraoctet. D'autres applications ont vu le jour. Ainsi la MRAM (Magnetic Random Access Memory) a connu un intérêt grandissant car elle offre des caractéristiques intéressantes comme la rapidité, et la non-volatilité de l'information même en l'absence de tension d'alimentation. En effet, les MRAM permet de remplacer les mémoires DRAM (Dynamic Random Access Memory) dans la mémoire vive des ordinateurs actuels avec des temps d'accès beaucoup plus courts. Et en contraire aux mémoires DRAM, l'information dans les MRAM n'est plus stockée sous forme de charges électriques mais sous forme de moments magnétiques grâce à la technologie des jonctions magnétiques tunnels. Ce type de mémoire non-volatile consomme beaucoup moins d'énergie que les mémoires DRAM actuelles car il n'a pas besoin d'un rafraichissement constant des données grâce aux propriétés des alliages Heusler qui possèdent une température de Curie élevée ce qui les rend intéressants, du côté de leur stabilité thermique pour leur applications dans des dispositifs, donc un atout décisif pour accroître l'autonomie de toutes les applications électroniques, les ordinateurs portables par exemple.

I.7. Conclusion

Dans ce chapitre nous sommes intéressés à présenter des généralités sur les alliages Heusler et leurs propriétés, ces derniers présentent des nombreux avantages qui pourraient bien s'adapter au domaine technologies actuelles et d'applications en électronique de spin.

Comme une forte aimantation, une température de Curie élevée et un faible amortissement magnétique. Cependant, une difficulté liée à l'utilisation des alliages de Heulsler sous forme découche minces provient de la nécessité qu'ils soient épitaxiaux et ordonnés qu'ils présentent des propriétés ferromagnétiques convenables. Malgré des nombreux travaux sur ces alliages, beaucoup de mécanismes restent mal compris, comme montré par les écarts entre prédictions

théoriques et résultats expérimentaux. Cela justifie le fait que, plus de cent ans après sa découverte, le nombre de travaux sur ces alliages ne cessent de s'agrandir.

Références

- [1] J. Thurin, « Electricité générale », 2ème édition, Eyrolles, Paris, (1974).
- [2] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG 5 (1903) 220.
- [3] C. Felser, A. Hirohata, Heusler Alloys Properties, Growth, Applications, Springer, New York, 2016.
- [4] T. Graf, C. Felser, and S. S. P. Parkin, Prog. Solid Stat Chem. 39,1 (2011).
- [5] A. Hirohata, M. Kikuchi, N. Tezuka, K. Inomata, J. Claydon, Y. Xu, and G. Vanderlaan, Heusler alloy/semiconductor hybrid structures, Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., vol. 10, no. 2, pp. 93–107, Apr. 2006.
- [6] S. Wurmehl, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H.J. Lin, Appl Phys Lett 88 (2006) 032503.
- [7] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, Angew Chem Int Ed 46 (2007) 668.
- [8] P.J Webster, J Phys Chem Solids 32 (1971) 1221 (02).
- [9] S. Sakurada, N. Shutoh, Appl Phys Lett 86 (2005) 082105.
- [10] H. Tuzcuoglu, « Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de Co_2FeAl », Laboratoire des sciences des procédés et des matériaux (LSPM) Université Paris Nord-Paris XIII, Thèse (2014).
- [11] Zenasni Hocine « Etude thermique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des alliages Heusler », Université de Tlemcen, Thèse (2013).
- [12] H.C. Kandpal, C. Felser, R. Seshadri, Journal of Physics D: Applied Physics, 39 (2006) 776.
- [13] J. Drews, U. Eberz and H. Schuster, J. Less-Common Met, 116, pp. 271-278 (1986).
- [14] X.F. Dai, G.D. Liu, L.J. Chen, J.L. Chen and G. Hu, J. Solid. State. Commun, 140, 533-537 (2006).
- [15] Bentaifour Djaouher, Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire NiCoMnGexSn_{1-x} . université de mostaganem

- [16] F. Dahmane, S. Amari, S. Bin Omran, B. Doumi, E. Yahiaoui and A. Tadjer, R. Khenata, Theoretical Investigation of the Structural, Magnetic and Band Structure Characteristics of $\text{Co}_2\text{FeGe}_{1-x}\text{Six}$ ($x = 0, 0.5, 1$) Full-Heusler Alloys.
- [17] R. A. de Groot and F. M. Mueller, « New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets » *Phys. Rev. Lett*, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. (1983)
- [18] I. Galanakis and P. H. Dederichs: Half-Metallicity and Slater-Pauling Behavior in the Ferromagnetic Heusler Alloys, *Lect. Notes Phys.* 676, 1–39 (2005).
- [19] A. Hirohata, M. Kikuchi, N. Tezuka, K. Inomata. *Current Opinion in Solide State and Material Science*, volume10, 93-107, 2006.
- [20]. A.FERT, « Image de la physique » ,74 (2000).
- [21]. A.FERT, J.M. George.H.Jaffrès, R. Mattana et P.Seneor, *Europhysics News*,34 (2003)
- [22].BINASCH, G., G RÜNBERG, P., S AURENBACH, F., AND ZINN, W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Phys. Rev.B* 39, 7 (Mar 1989), 4828–4830.
- [23] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, *Phys Rev Lett* 57 (1986) 2442.
- [24] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, *Phys Rev Lett* 61 (1988) 2472.
- [25] N. F. Mott, *Prac Roy.Soc.* A153 (1936) 699.
- [26] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers, *Characterization of Fat Fractals in Nonlinear Dynamical Systems*, *Phys Rev Lett* 57 (1986) 2442.
- [27] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau , F. Petroff P.Etienne, *Phys Rev Lett* 61 (1988) 2472.
- [28] S. Kämmerer, A. Thomas, A. Hütten, G. Reiss, *Appl Phys Lett* 85 (2004) 79
- [29] K. Inomata, S. Okamura, R. Goto, N. Yezuka, *Jpn J Appl Phys* 42 (2003) L419.
- [30] C. Herbot, E.A. Jorge, M. Jordan, *Appl Phys Lett* 94 (2009) 142504.

Chapitre II : Résultats et discussion

II.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats qu'on a obtenus et la discussion sur les propriétés structurales et électroniques des deux alliages Heusler Co_2FeGe et Co_2FeSi en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (LAPW) basée sur théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en particulier l'approximation du gradient généralisé (GGA) implémentée dans le code WIEN2k.

II.2. Détail de calcul

Dans ce travail, les calculs ont été effectués en utilisant le code Wien2k [1], qui est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (LAPW) [2] dans le cadre de la DFT [3], ainsi le potentiel d'échange et de corrélation est décrit par l'approximation du gradient généralisé (GGA) [4] paramétrée par Perdew, Burke, et Ernzerhof [5].

II.3. Structure cristalline des composés Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$)

Les composés Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) cristallisent dans une structure CFC avec que le groupe d'espace Fm-3m . chaque atome occupe une position déliée dans le cristal.

II.3.1. Les positions des atomes de composé Co_2FeGe

a. Structure Cu_2MnAl

- Co I prend la position A (0, 0, 0).
- Co II prend la position B (0.5, 0.5, 0.5).
- Fe prend la position C (0.25, 0.25, 0.25).
- Ge prend la position D (0.75, 0.75, 0.75).

b. Structure Hg_2CuTi

- Co I prend la position A (0, 0, 0).
- Co II prend la position B (0.25, 0.25, 0.25).
- Fe prend la position C (0.5, 0.5, 0.5).
- Ge prend la position D (0.75, 0.75, 0.75).

La configuration électronique de chaque élément est :



[Fe] $1S^22S^22P^63S^23P^63d^64S^2$.

[Ge] $1S^22S^22P^63S^23P^63d^{10}4S^24P^2$.

[Si] $1S^22S^22P^63S^23P^6$.

La représentation de la structure cristalline des composés Co_2FeX ($X = Ge, Si$) est schématisée dans la figure II.1.

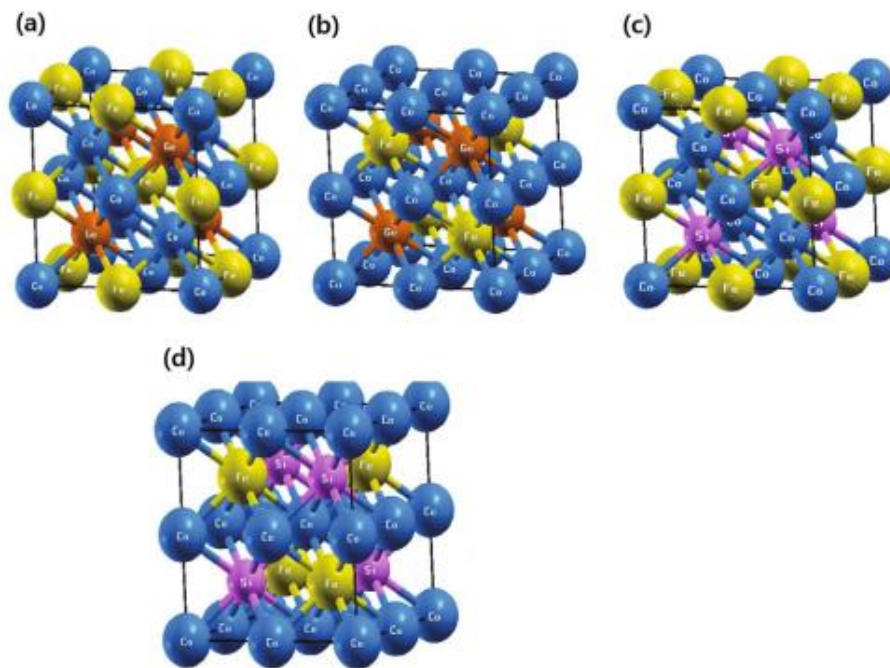


Fig. II. 1. Structure cristalline de: (a) Co_2FeGe (Hg_2CuTi structure), (b) Co_2FeGe (Cu_2MnAl structure), (c) Co_2FeSi (Hg_2CuTi structure), (d) Co_2FeSi (Cu_2MnAl structure) [6].

II.4. Propriétés structurales

L'objectif de ce travail est de savoir comment les propriétés structurales et électroniques des alliages Heusler variée en fonction de volume, et Pour déterminer les propriétés structurales et électroniques des alliages full-Heusler, nous avons commencé par le calcul des propriétés structurales des composée Co_2FeGe et Co_2FeSi .

Et pour déterminé Le paramètre du réseau a_0 , module de compressibilité B_0 (Bulk modulus) et le dérivé du module de compressibilité B'_0 , Cette étude nous permet de prédire la phase du matériau la plus stable à travers les valeurs des énergies à l'état d'équilibre.

En ajustant l'énergie totale en fonction du volume en fonction de l'équation de Murnaghan donné par la relation suivant [7].

$$E = E_0(V) + \frac{BV}{B'(B'-1)} \left[B \left(1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right] \quad (2.01)$$

Avec :

E_0 : L'énergie d'équilibre

V_0 : Le volume d'équilibre

B : Le module de compressibilité

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (2.02)$$

B' : La première dérivée du module de compressibilité

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (2.03)$$

La constante du réseau à l'équilibre est donnée par le minimum de la courbe (V). Les valeurs des paramètres de maille (a), le module de compression (B) et son dérivé (B'), et la valeur d'énergie fondamentale sont regroupés dans le tableau II.1.

Tableau II.1 présente les paramètres de maille (a), le module de compression (B) et sa dérivé (B'), et la valeur d'énergie fondamentale E_0

Composé	a (Å)	B (GPa)	B'	E_0
Co ₂ FeGe (Hg ₂ CuTi)	5.68	183.29	6.06	-12317.66
Co ₂ FeGe (Cu ₂ MnAl)	5.73 5.758 [6] 5.738 exp [6,8]	191.97 162.677 [6]	4.08	-12317.69
Co ₂ FeSi (Hg ₂ CuTi)	5.58	215.75	5.55	-8699.66
Co ₂ FeSi (Cu ₂ MnAl)	5.62 5.640 exp [6]	209.90	5.19	-8699.69

D'après les résultats regroupés dans le tableau II.1, nous pouvons conclure que les deux matériaux se stabilisent dans la structure Cu_2MnAl avec une basse valeur d'énergies.

Les figures ci-dessous présentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume de deux alliages Co_2FeGe et Co_2FeSi respectivement, en deux structures (Hg_2CuTi et Cu_2MnAl) en utilise l'approximation GGA.

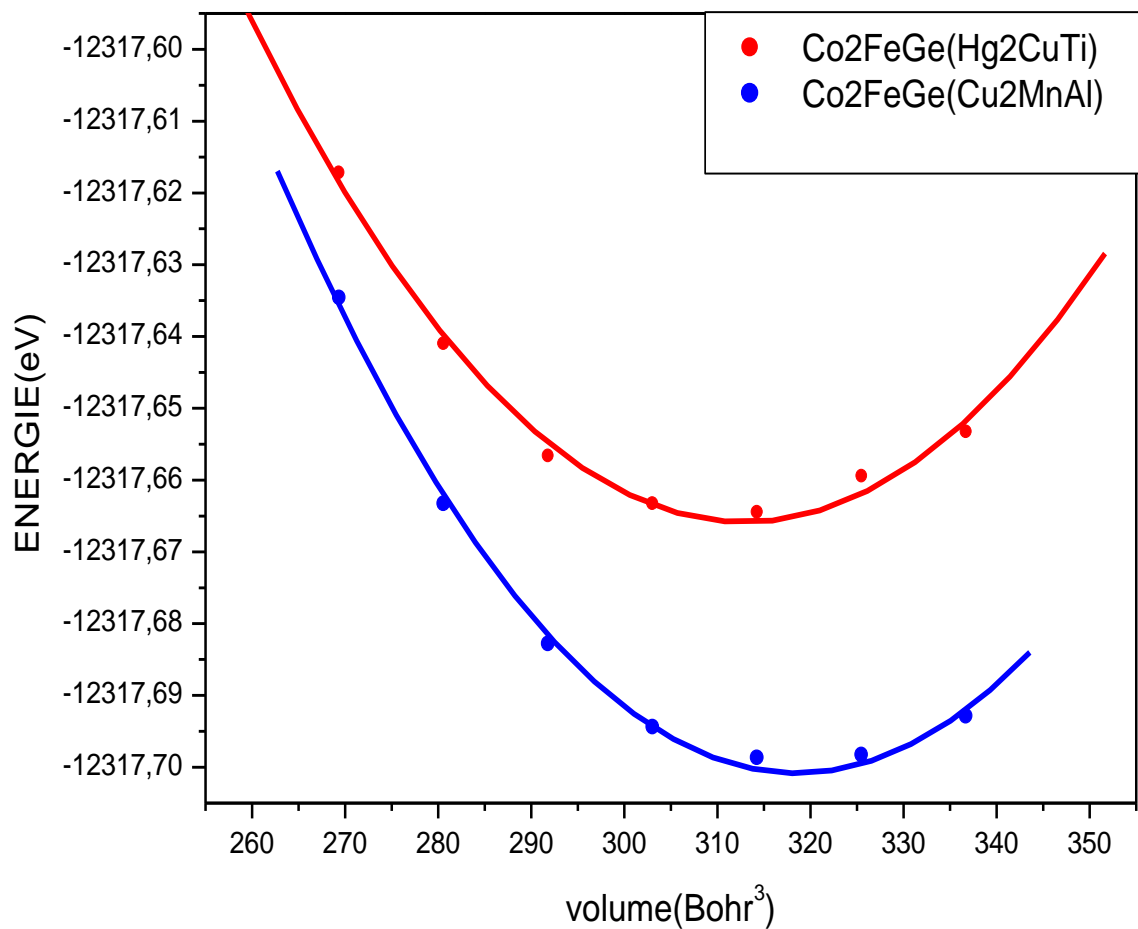


Fig. II.2 La variation de l'énergie totale en fonction du volume à deux structures (Hg_2CuTi et Cu_2MnAl) pour alliage Co_2FeGe .

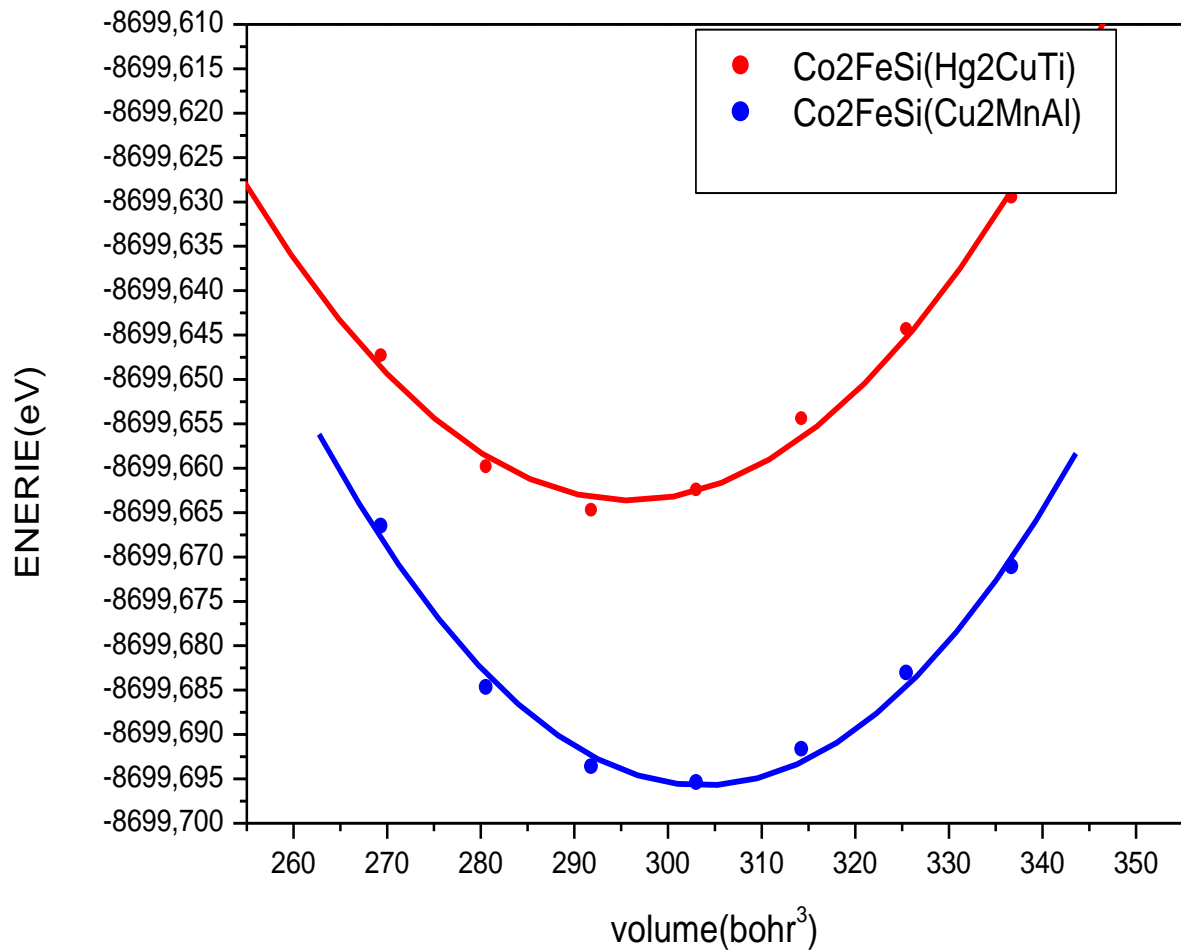


Fig. II.3 La variation de l'énergie totale en fonction du volume à deux structures (Hg₂CuTi et Cu₂MnAl) pour alliage Co₂FeSi.

Les figures (II.2 et II.3) présentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour chaque alliage Co₂FeGe et Co₂FeSi, optimisé ces alliages pour les deux structures de type Cu₂MnAl et Hg₂CuTi.

On peut voir sur les deux figures (II.2 et II.3) que la structure de type Cu₂MnAl énergétiquement plus basse, alors la structure de type Cu₂MnAl est plus stable à l'équilibre.

II.5. Les propriétés électroniques

L'analyse des structures électroniques d'un composé permet de préciser son caractère isolant, conducteur ou semi-conducteur ainsi que la nature précise des liaisons entre les atomes constituant le solide. Cette analyse permet une bonne compréhension des différentes propriétés du matériau à l'échelle microscopique. En effet, la plupart des propriétés physiques sont directement liées aux propriétés électroniques. Pour caractériser la structure électronique d'un solide, nous disposons d'outils complémentaires que sont la densité de charge, la densité d'états électroniques (DOS) et la structure de bandes [9].

Dans cette partie on a étudié les propriétés électroniques des composés Co_2FeX ($\text{X} = \text{Ge}, \text{Si}$). Le calcul des résultats obtenus par l'utilisation de l'approximation GGA pour deux structures. Cette dernière est pour le but d'améliorer le gap énergétique.

II.5.1 La structure de bande d'alliage Co_2FeX ($\text{X} = \text{Ge}, \text{Si}$)

La bande d'énergie est une représentation des valeurs d'énergie pour un électron en fonction de vecteur d'onde k .

On définit le gap d'énergie comme la différence entre le maximum de la bande de valence en un point précisé et le minimum de la bande de conduction au même point ou un autre.

$$E_g = \Delta E = E_c - E_v \quad (2.04)$$

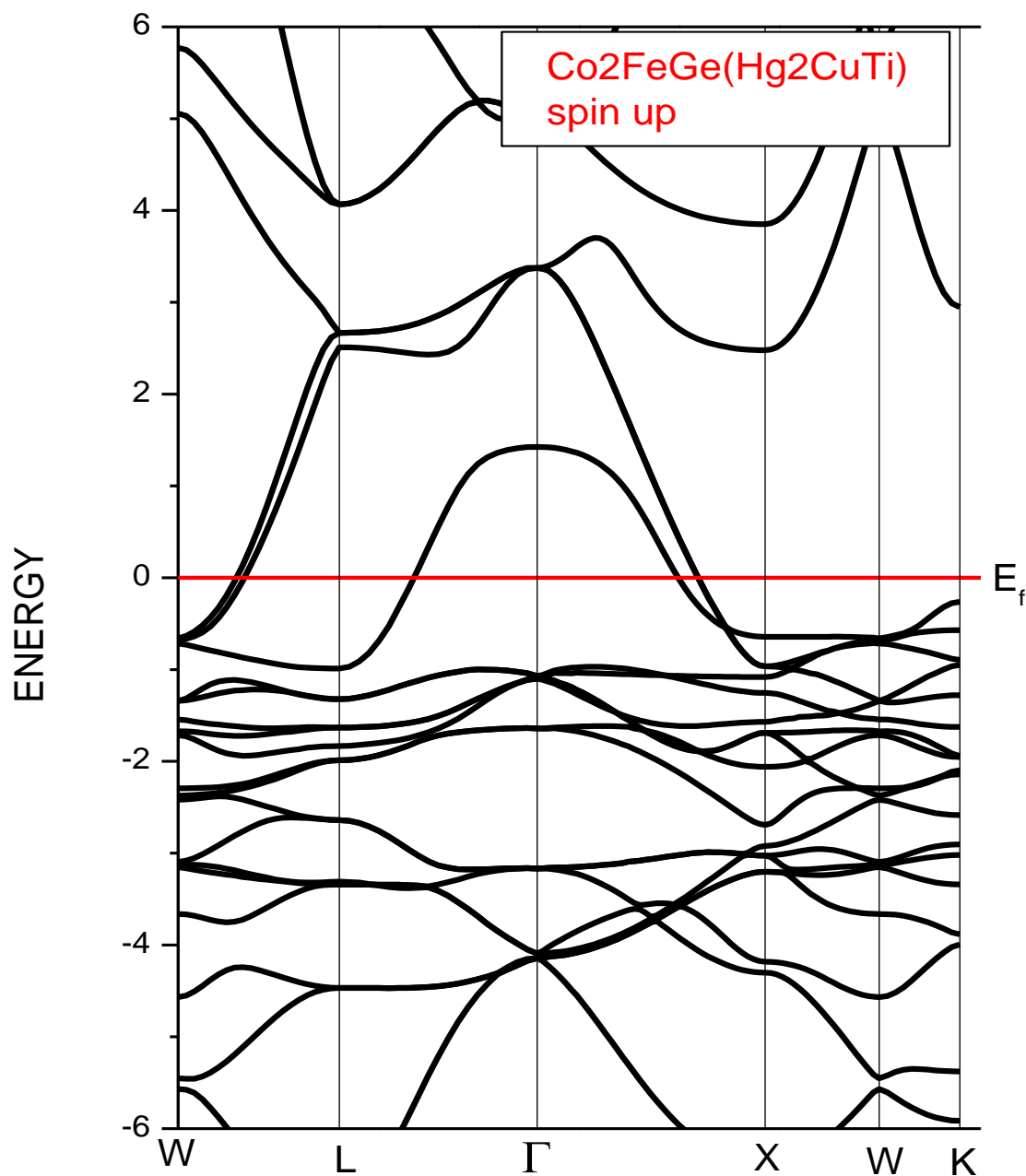
II.5.1.1. le composé Co_2FeGe 

Fig. II.4 Structures de bandes (spin up) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeGe}(\text{Hg}_2\text{CuTi})$

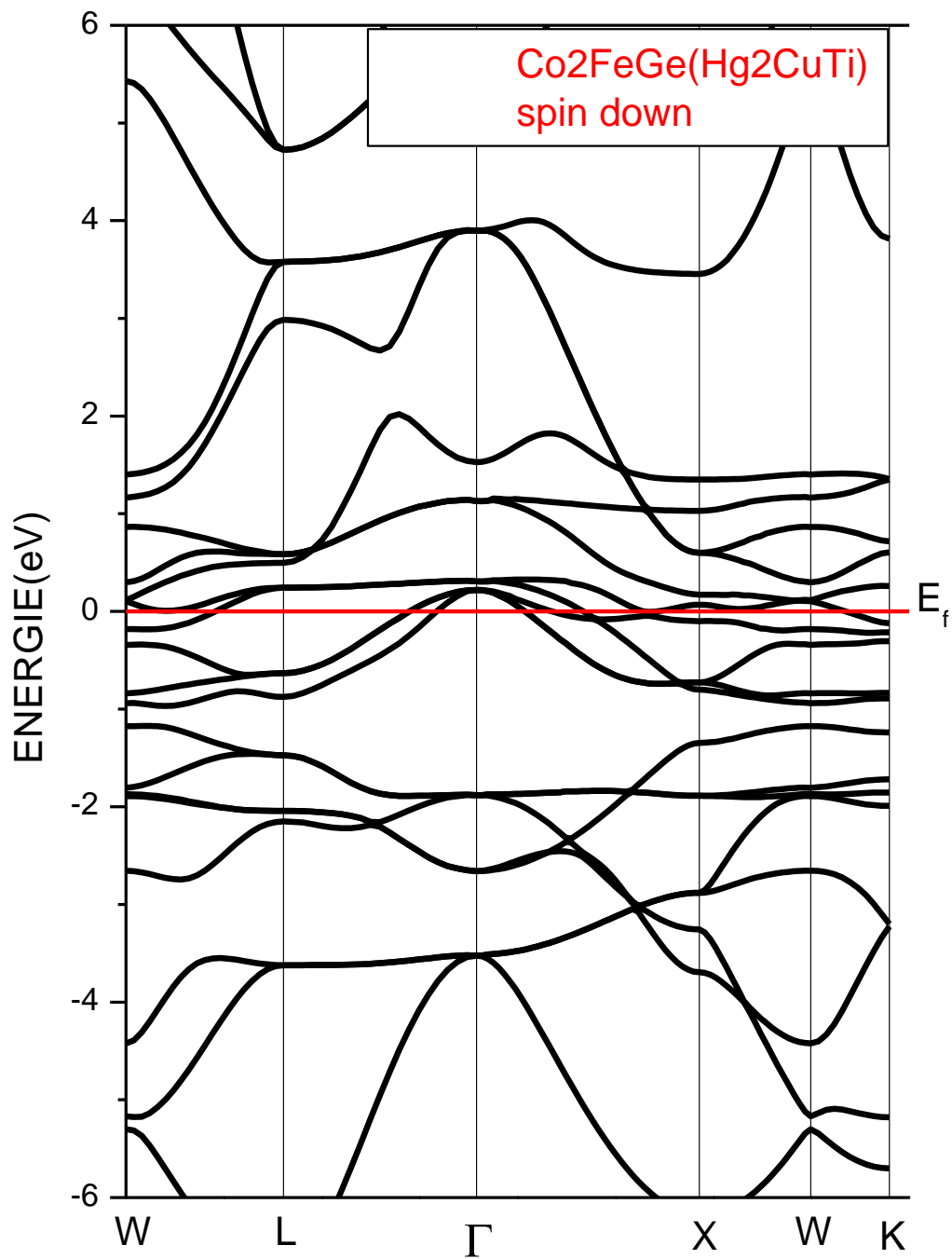


Fig. II.5 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeGe}(\text{Hg}_2\text{CuTi})$

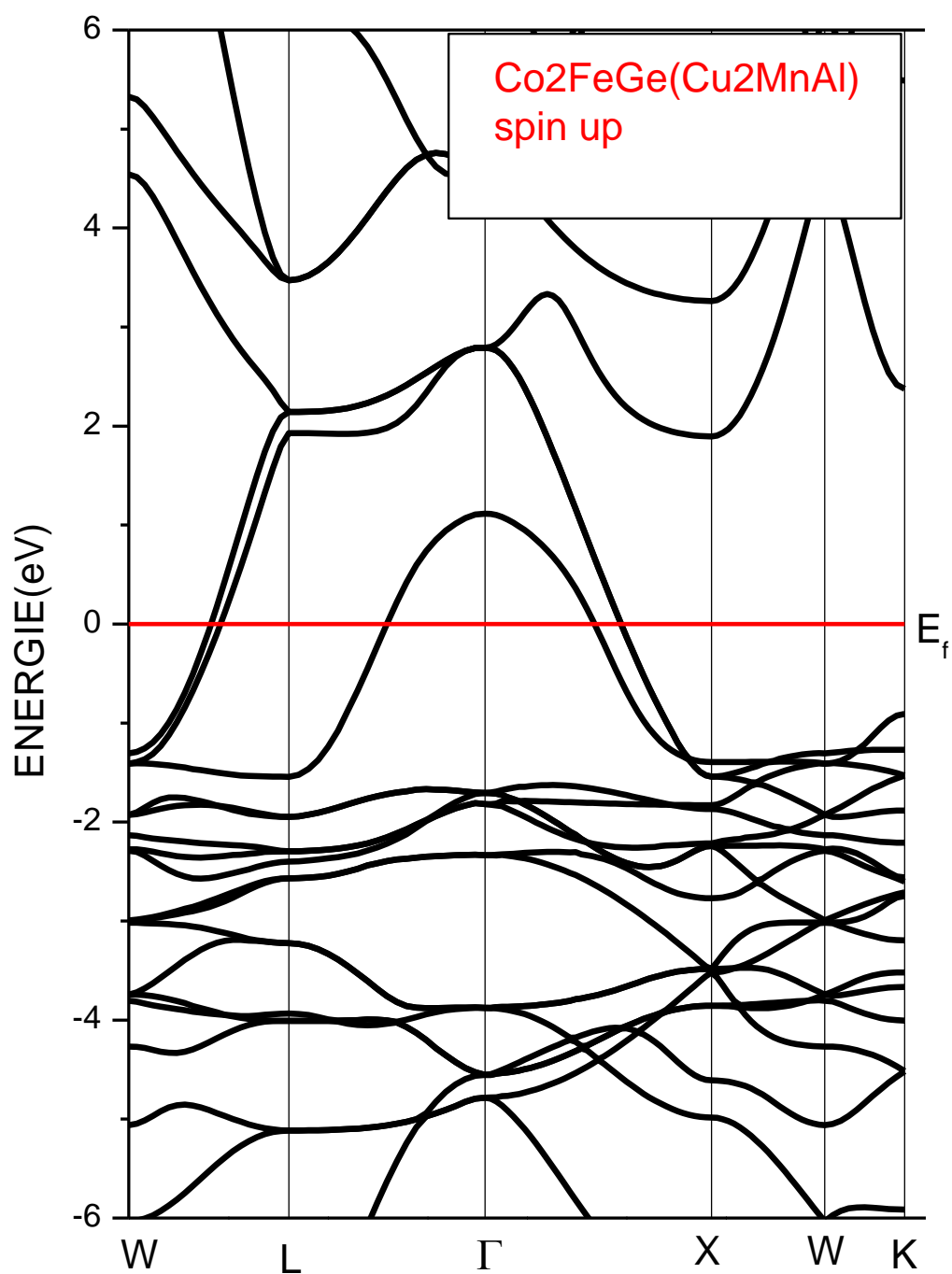


Fig. II.6 Structures de bandes (spin up) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeGe}(\text{Cu}_2\text{MnAl})$

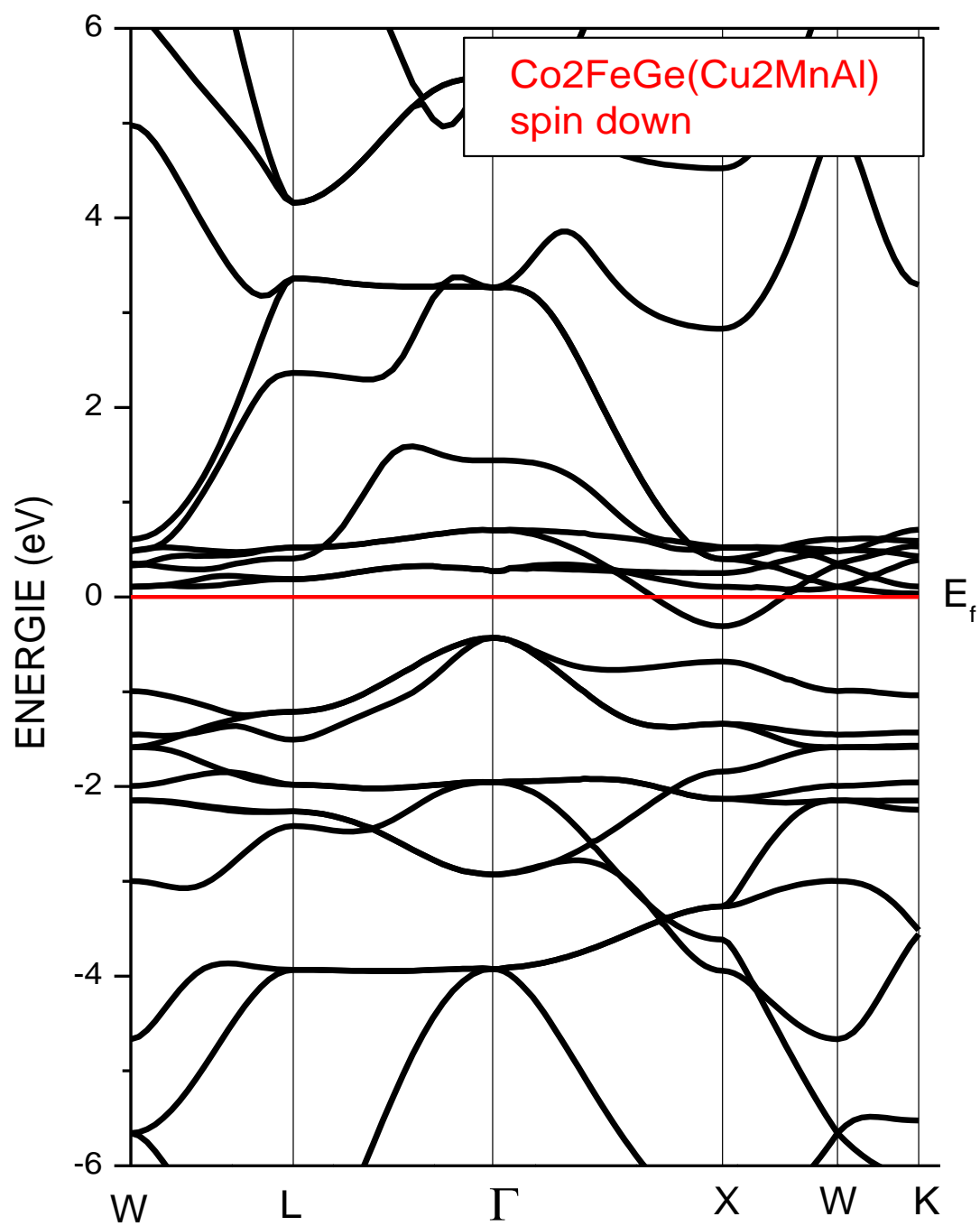
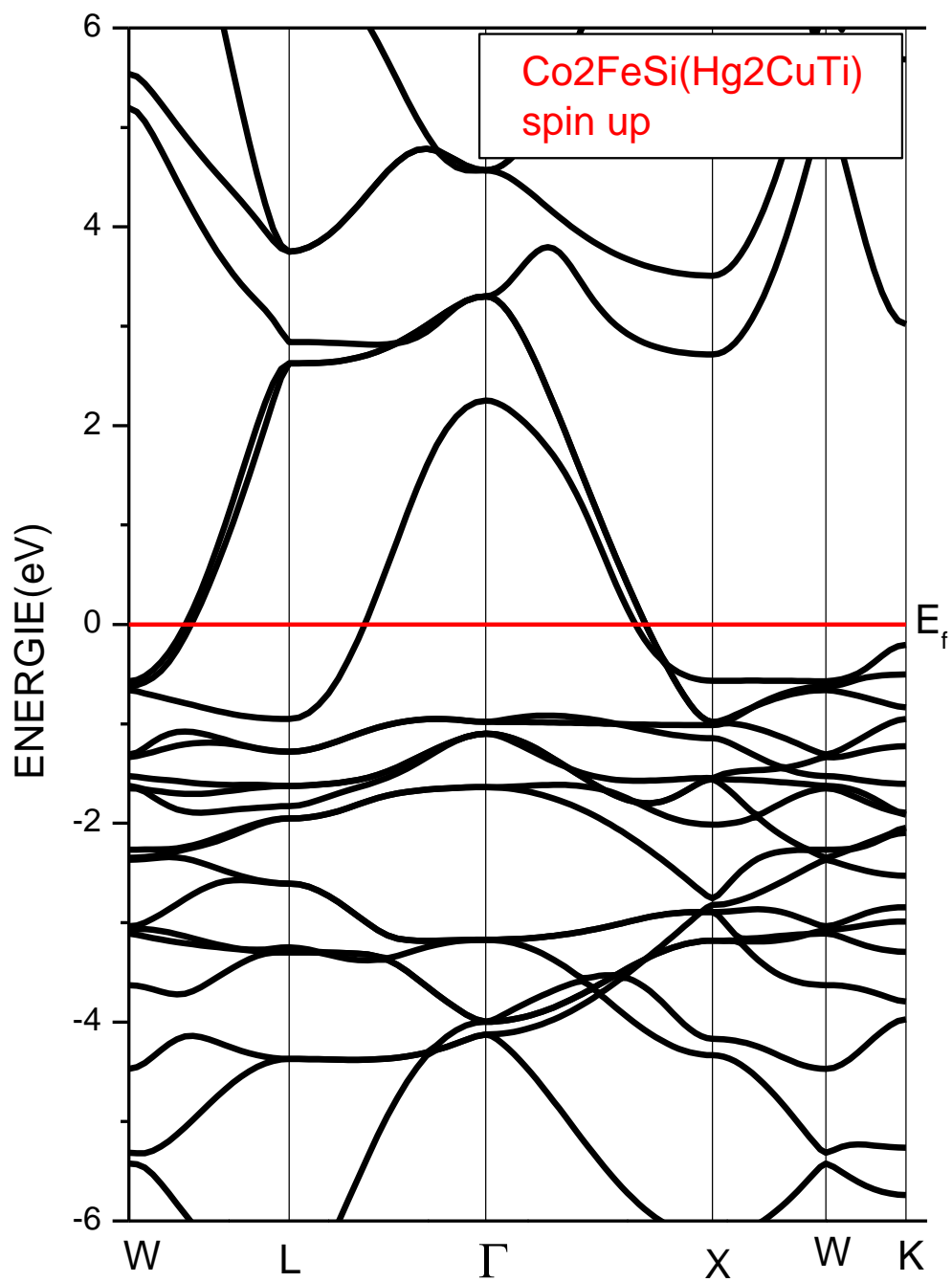


Fig. II.7 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeGe}(\text{Cu}_2\text{MnAl})$

II.5.1.2. Le composé Co_2FeSi 

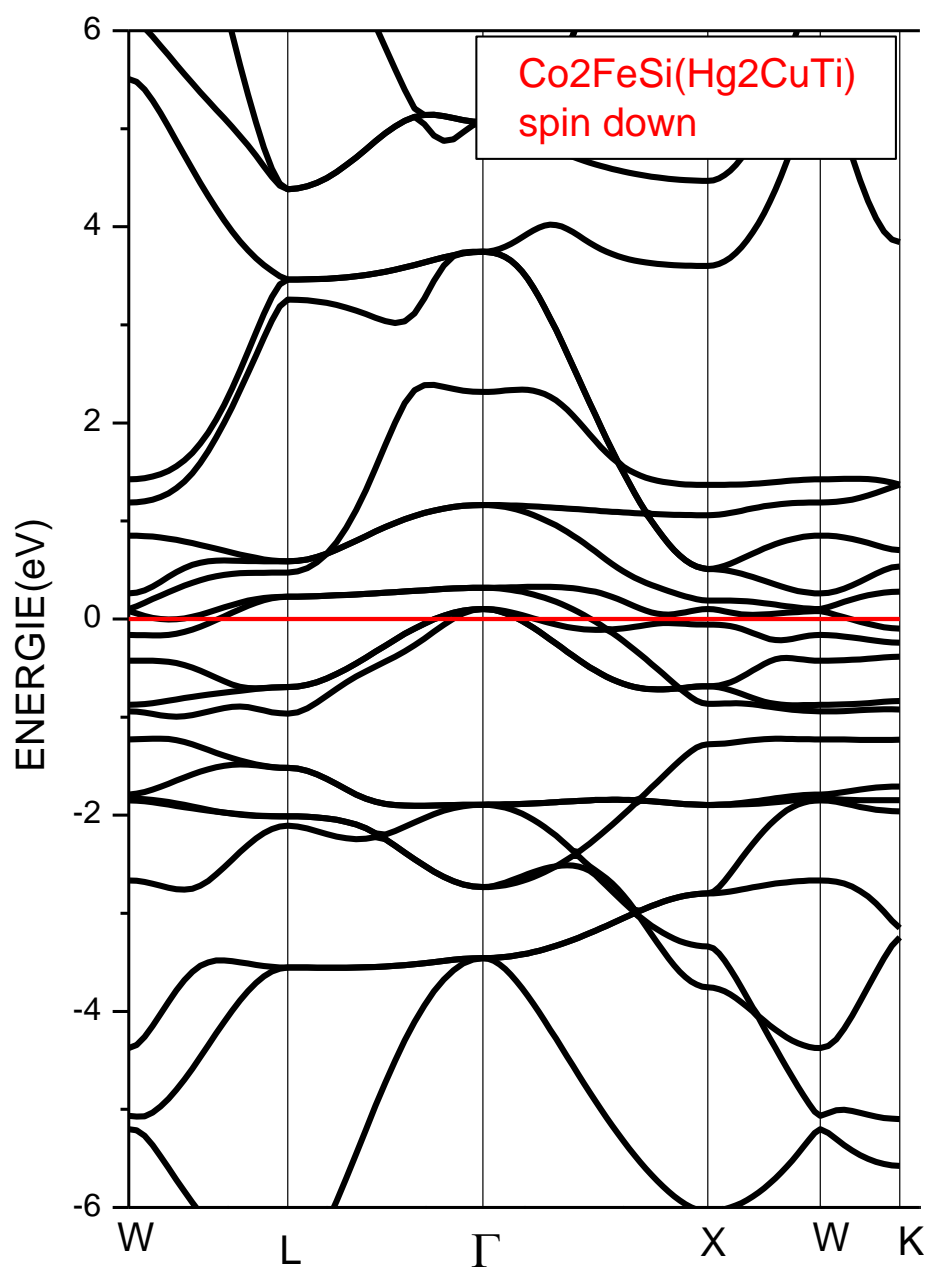


Fig. II.9 Structures de bandes (spin dn) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeSi}(\text{Hg}_2\text{CuTi})$

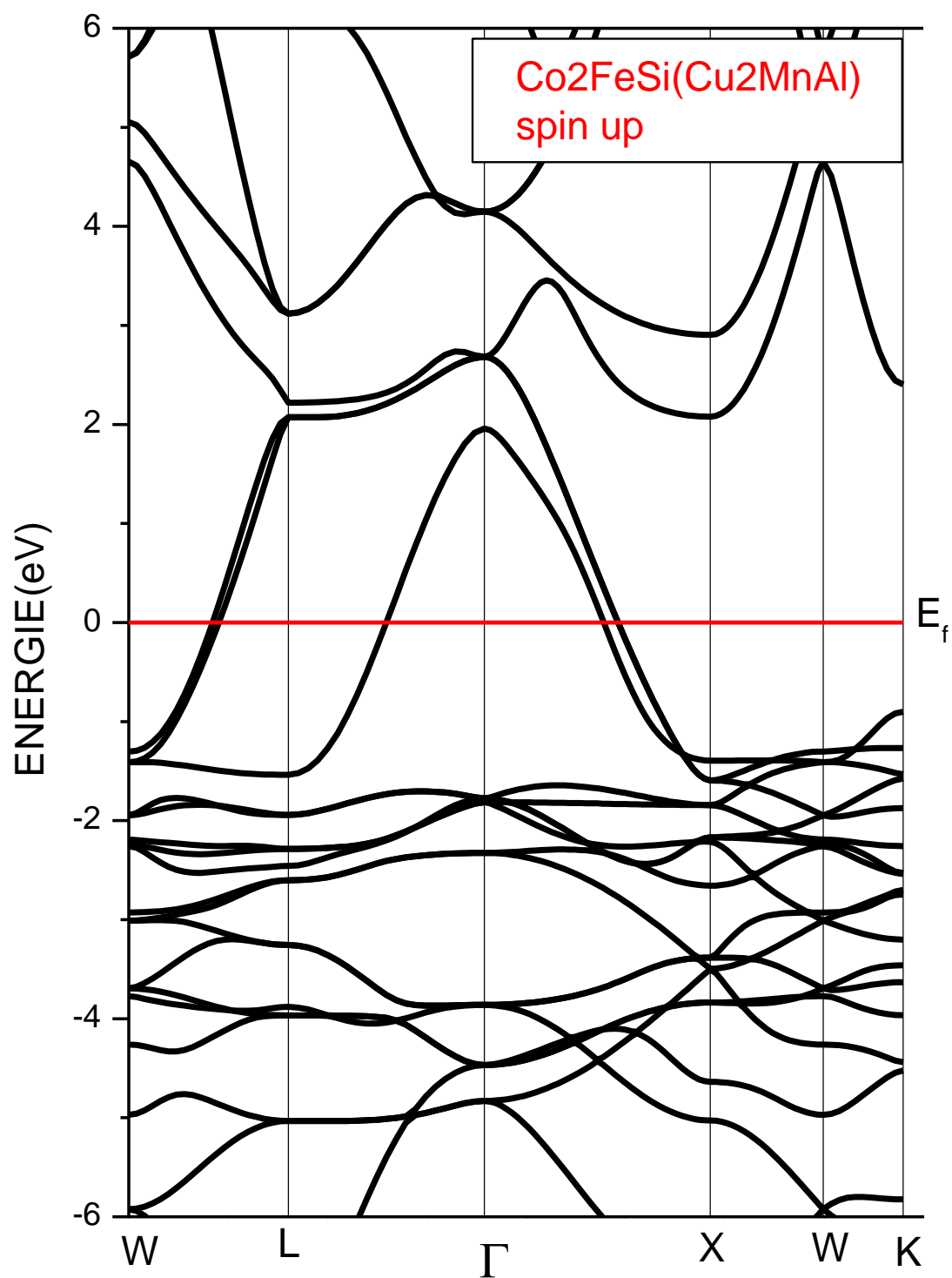


Fig. II.10 Structures de bandes (spin up) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeSi}(\text{Cu}_2\text{MnAl})$

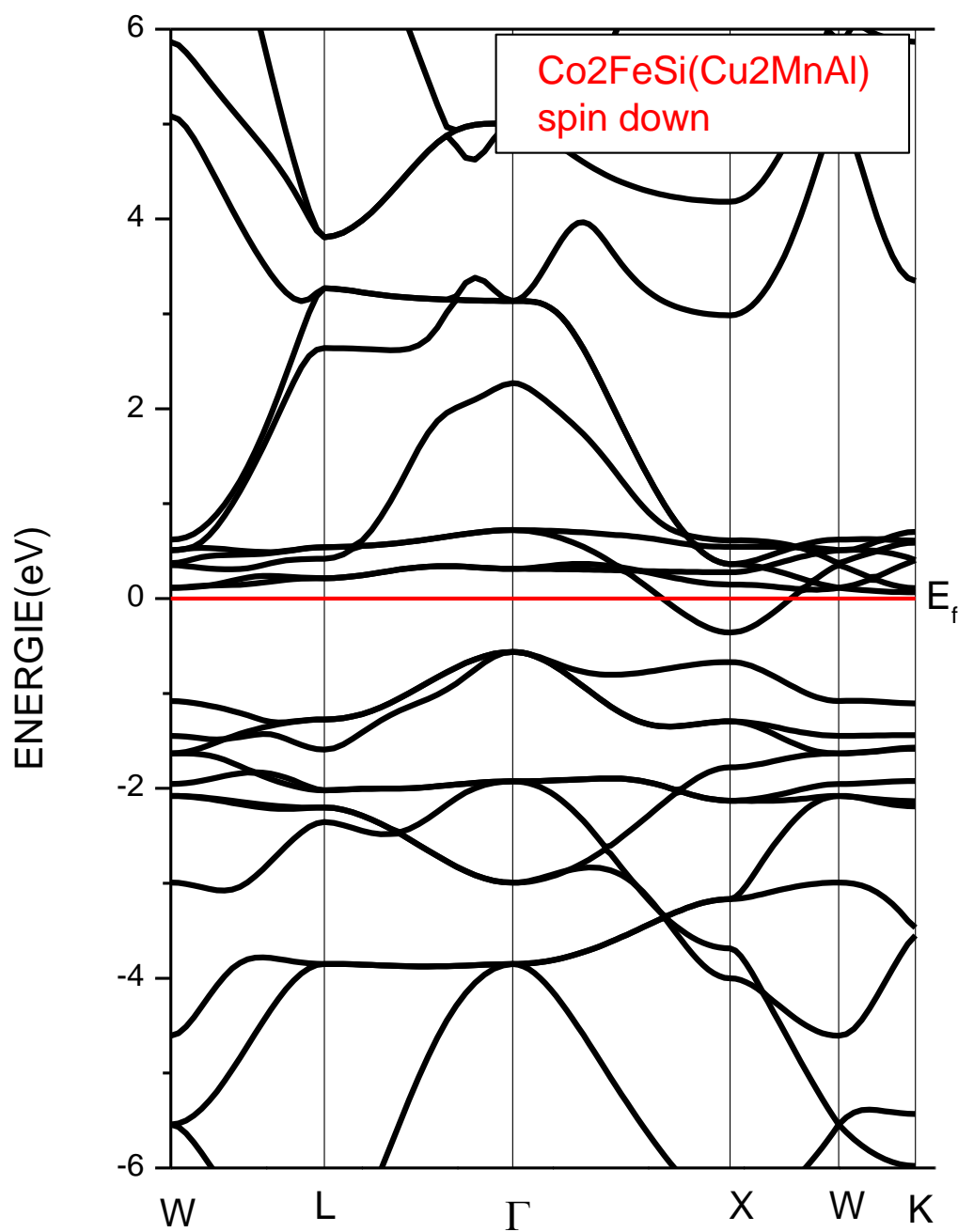


Fig. II.11 Structures des bandes (spin dn) de l'alliage $\text{Co}_2\text{FeSi}(\text{Cu}_2\text{MnAl})$.

- Selon les figures II.4 ,II.5 ,II.8 et II.9 de la structure de la bande de type Hg_2CuTi du composés Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) on remarque l'absence du gap énergétique (bande interdit), et en voir un chevauchement entre la bande de valence et la bande de conduction pour les deux cas spin majoritaires (up) et minoritaires (down), pour cette raison nous résulte que les composés Co_2FeGe , Co_2FeSi est un métal dans structure inverse (Hg_2CuTi).
- Pour la structure de bande de type Cu_2MnAl représenté dans les figures II.6, II.7, II.10, et II.11 on n'observe que les bandes obtenues présentent un gap d'énergie à l'état de spin minoritaire (down) de valeur égal à 0.2 eV, alors que dans la figure du spin majoritaire (up) on a un chevauchement a été constaté entre les bandes d'énergie de structure et le niveau de fermi E_F . Cette différence entre les deux spins affirme que les composés Co_2FeGe et Co_2FeSi sont des demi-métaux à structure direct (Cu_2MnAl) .

II.5.2 La densité d'état (DOS) d'alliage Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$)

Pour mieux comprendre la structure de bande, il est aussi intéressant de déterminer les densités d'états totales et partielles afin de savoir quel type d'hybridation et quels états sont responsable de la liaison.

Nous avons calculé les densités d'état totales (TDOS) et partielles (PDOS) (Figure II.12, II.13, II.14 et II.15) de nos matériaux par la méthode du Tétraèdre, qui nécessite une grille contenant un grand nombre de points dans la zone de Brillouin. Dans toutes les figures, les énergies sont rapportées au niveau de Fermi E_F . Le niveau de Fermi sépare la bande de valence BV et la bande de conduction BC. A partir des densités d'états partielles, on peut définir le caractère de chaque région de ces composés.

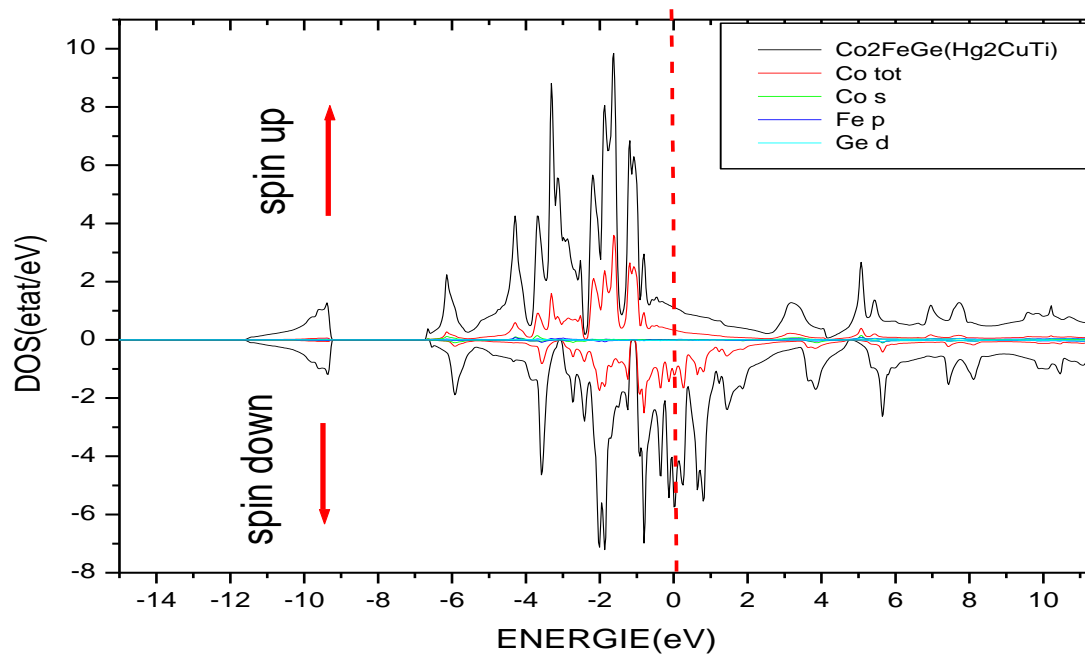


Fig. II.12 La densité d'états électroniques du Co_2FeGe dans la structure Hg_2CuTi .

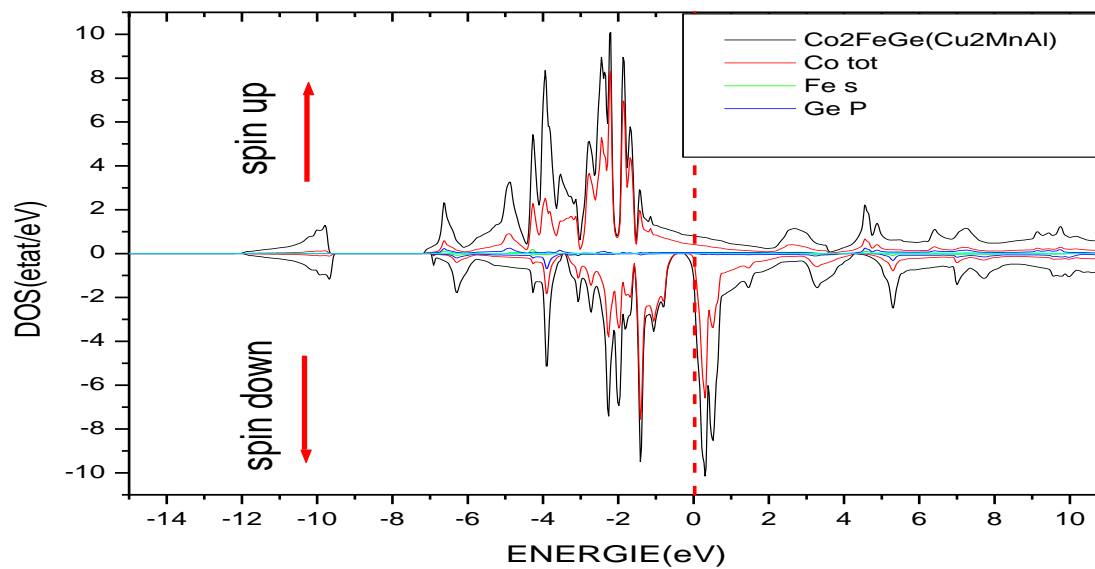


Fig. II.13 La densité d'états électroniques du Co_2FeGe dans la structure Cu_2MnAl .

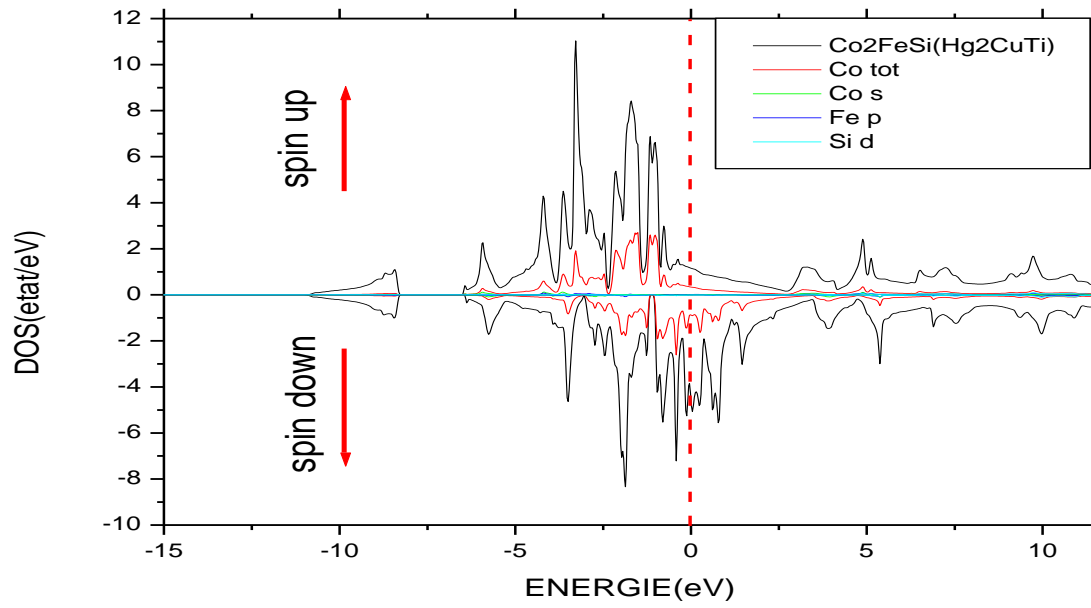


Fig. II.14 La densité d'états électroniques du Co_2FeSi dans la structure Hg_2CuTi .

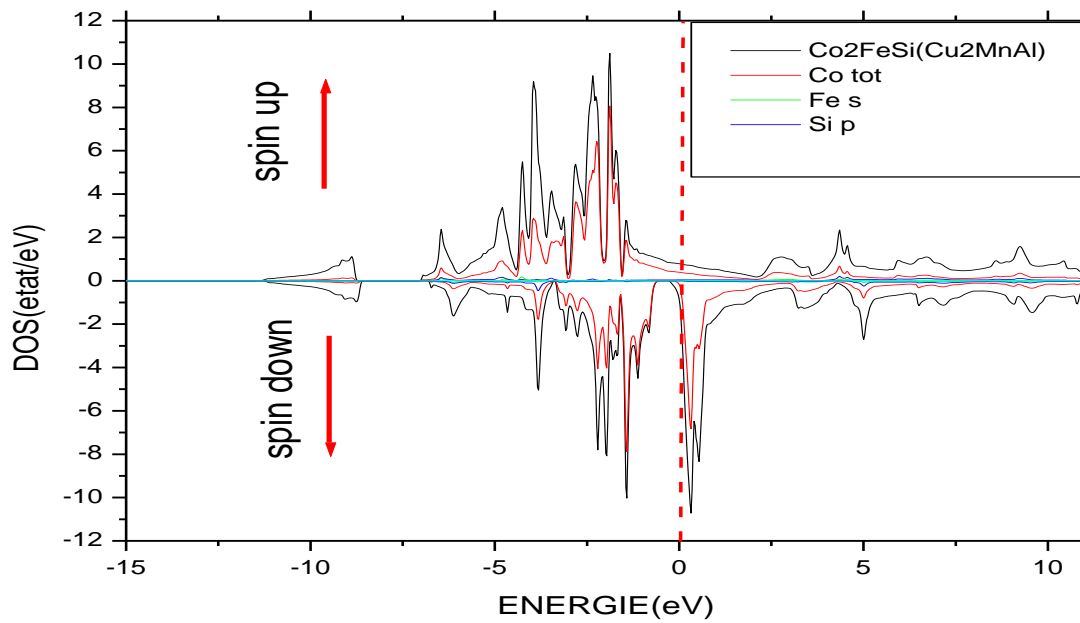


Fig. II.15 La densité d'états électroniques du Co_2FeSi dans la structure Cu_2MnAl .

- Les figures II.12 et II.14 présente la densité d'état (DOS) de Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) au structure Hg_2CuTi , on observe le spin majoritaire (up) et spin minoritaire (down) fini au niveau de Fermi donc on conclut que le matériau prend un caractère métallique.
- Les figures II.13 et II.15 présentent La densité d'état (DOS) de Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) de structure Cu_2MnAl , présente que les l'états à spin majoritaire (spin up) conduisent à un DOS fini à l'énergie de Fermi donc les électrons en rotation ont un nature métallique, alors que les états à spin minoritaire (spin down) présentent un semi-conducteur avec un gap énergétique .Alors les résultats similaires ont été observés par Seema et Kumar [10] dans la structure Cu_2MnAl , l'alliages Co_2FeX ($X = \text{Ge}, \text{Si}$) montre un comportement half-métal (HM).
- Dans les quatre figure (II.12, II.13, II.14 et II.15) on observe que la contribution des éléments Co beaucoup plus dominante que les autres éléments, dans une intervalle d'énergie situé entre $[-6, 2]$ eV. Par contre une très faible contribution des éléments Fe, Ge et Si.
- On observe l'asymétrie des états de spin up et down, on note la présence d'un décalage des états de spin up et down dans l'intervalle $[-4, 6]$ eV.

Références

- [1] S. H. Wei, H. Krakauer, and M. Weinert, Phys. Rev. B32, 7792 (1985).
- [2] O. K. Anderson, Phys.Rev.12, 3060 (1975)
- [3] Singh. D. Planes waves, pseudo-potentials and the LAPW method. Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers , (1994).
- [4]] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. A. Perderson, D. J. Singh and C. Fiolhais, phys Rev. B.46 (1992) 6671.
- [5] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev.Let.77 (1996) 3865.
- [6] F. Dahmane, S. Amari, S. Bin Omran, B. Doumi, E. Yahiaoui and A. Tadjer, R. Khenata, Theoretical Investigation of the Structural, Magnetic and Band Structure Characteristics of $\text{Co}_2\text{FeGe}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x = 0, 0.5, 1$) Full-Heusler Alloys.
- [7] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390.
- [8] B. Blake, S. Wurmehl, G.H. Fecher, C. Felser, Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 172501.
- [9] B.Pradines « Structure électronique et propriétés magnétiques statiques et dynamiques d'alliages d'Heusler partiellement désordonnés et d'hétérostructures tout-Heusler.thèse de doctorat, 2017.
- [10] K.Seema and R. Kumar, Appl. Phys. A 116 (2014) 1199{1209.

Conclusion générale

L'objectif de ce travail était d'étudier les propriétés structurales comme la constante de réseau a , le module de compressibilité B et sa dérivé B' et la stabilité des structures dans les deux cas (Hg_2CuTi et Cu_2MnAl) d'une classe d'alliages appelés les alliages Heusler donnée par la formule chimique (Co_2FeGe et Co_2FeSi), les propriétés électroniques telles que structure des bandes, la densité d'états, et les gaps énergétiques correspondants, Ces matériaux ont été étudiés par la méthode des ondes planes (augmentées et linéarisées LAPW) mis en application dans le code Wien2k dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT). En utilisant l'approximation GGA (generalized gradient approximation).

Comme première étape, dans le premier chapitre on a commencé notre travail par une généralité sur les alliages Heusler et leur propriétés structurales, électroniques et même leur applications dans le domaine technologiques. Pour deuxième étape, dans Le dernier chapitre contient les résultats trouvés dans mes calculs et leur discussion.

- Nous avons commencé par étudier les propriétés structurales qui montrent que nos matériaux (Co_2FeGe et Co_2FeSi) sont stables dans la phase Cu_2MnAl .
- Les résultats obtenus pour le paramètre de réseau dans ce travail sont en bon accord avec les valeurs théoriques disponibles pour les deux alliages dans les différentes structures.
- Le calcul des propriétés électroniques (la DOS et structure des bandes) montre que les deux composés Co_2FeGe et Co_2FeSi prennent un comportement métal dans la structure de type Hg_2CuTi et un comportement demi-métal dans la structure de type Cu_2MnAl .

