

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 : Physique de Nanophysique

Par

**Benalia RATA**

Thème

---

*Étude comparative des structures de type  $Hg_2CuTi$  et  $Cu_2MnAl$   
pour les alliages heusler  $MnCoZ$  ( $Z = Al, Ga$ )*

---

Soutenu le / /2020 devant le jury composé de :

*Président :* . **Centre universitaire de Tissemsilt**

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

*Examineur :* . **Centre universitaire de Tissemsilt**

Année universitaire 2019-2020

## Résumé

Le but de ce travail est d'étudier et de comparer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des deux structures ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  et  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) des alliages heusler  $\text{Mn}_2\text{CoZ}$  ( $Z = \text{Al}$ ,  $\text{Ga}$ ). Les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées (LAPW), et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation de la densité du gradient généralisée (GGA). Le résultat montre que les deux composés sont stables dans la structure  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  et montre également un comportement demi-métallique dans la structure  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  du composé  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ .

### Mots clés :

Les propriétés structurales, les propriétés électroniques, alliages heusler, GGA,  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ ,  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$ , LAPW.

## ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة ومقارنة الخواص البنيوية والإلكترونية والمغناطيسية للبنيتين ( $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  و  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ) لسبائك هوسلر  $\text{Mn}_2\text{CoZ}$  ( $Z = \text{Al}, \text{Ga}$ ). تم إجراء الحسابات باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة (LAPW)، ولتحديد التبادل وإمكانية الارتباط، تم استخدام تقريب كثافة التدرج المعمم (GGA). تظهر النتيجة أن المركبين مستقران في بنية  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  ويظهران أيضاً سلوكاً شبه معدني في بنية  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  لمركب  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ .

## الكلمات مفتاحية:

الخصائص البنيوية، الخواص الإلكترونية، السبائك هوسلر، GGA،  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ ،  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$ ، LAPW.

## **Abstract**

The aim of this work is to study and compare the structural, electronic and magnetic properties of the two structures ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  and  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) of heusler alloys  $\text{Mn}_2\text{CoZ}$  ( $Z = \text{Al, Ga}$ ). The calculations were performed using the augmented plane wave method (LAPW), and to determine the exchange and correlation potential, the generalized gradient density approximation (GGA) was used. The result shows that the two compounds are stable in the  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  structure and also shows a half-metallic behavior in the  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  structure of the  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$  compound.

### **Keywords:**

Structural properties, electronic properties, heusler alloys, GGA,  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ ,  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$ , LAPW.

## 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 M. Moukhtari, 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 .Dr Boumia Lakhdar, Dr Dahmane Fethallah 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.

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.

Benalia RATA

## List des figures

|  |    |
|--|----|
| <b>Figure. 1. 1.</b> Le nombre des matériaux Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs..... | 15 |
| <b>Figure. 1. 2.</b> La structure Heusler $L2_1$ (Full-Heusler).....   | 17 |
| <b>Figure. 1. 3.</b> Structure de demi-Heusler (Half-Heusler).....   | 18 |
| <b>Figure. 1.4.</b> Représentation schématique de la densité d'états d'un métal, d'un semiconducteur et d'un demi-métal.....                     | 20 |
| <b>Figure. 1.5.</b> Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.....   | 21 |
| <b>Figure. 1.6.</b> Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.....   | 22 |
| <b>Figure. 2.1.</b> Structure cristalline du composé $Mn_2CoAl$ , ( $Cu_2MnAl$ et $Hg_2CuTi$ respectivement).....                                | 30 |
| <b>Figure. 2.2.</b> La variation de l'énergie totale en termes de volume du composé $Mn_2CoAl$ , ( $Cu_2MnAl$ et $Hg_2CuTi$ ).....               | 31 |
| <b>Figure. 2.3.</b> La variation de l'énergie totale en termes de volume du composé $Mn_2CoGa$ , ( $Cu_2MnAl$ et $Hg_2CuTi$ ).....               | 32 |
| <b>Figure. 2.4.</b> La structure de bande de l'alliage $Mn_2CoAl$ type $Cu_2MnAl$ .....  | 34 |
| <b>Figure. 2.5.</b> La structure de bande de l'alliage $Mn_2CoAl$ type $Hg_2CuTi$ .....  | 35 |
| <b>Figure. 2.6.</b> La structure de bande de l'alliage $Mn_2CoGa$ type $Cu_2MnAl$ .....  | 36 |
| <b>Figure. 2.7.</b> La structure de bande de l'alliage $Mn_2CoGa$ type $Hg_2CuTi$ .....  | 37 |

## List des tableaux

|   |    |
|---|----|
| <b>Tableau 1.1.</b> Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type $C1_b$ .....  | 19 |
| <b>Tableau 2.1.</b> Constante de réseau optimisée $a_0$ , module de compressibilité $B$ , dérivées de module de compressibilité $B'$ , énergie totale $E_0$ et le volume de la maille élémentaire du composé $Mn_2CoAl$ ..... | 31 |
| <b>Tableau 2.2.</b> Constante de réseau optimisée $a_0$ , module de compressibilité $B$ , dérivées de module de compressibilité $B'$ , énergie totale $E_0$ et le volume de la maille élémentaire du composé $Mn_2CoGa$ ..... | 32 |
| <b>Le tableau 2.3.</b> Le moment magnétique total et local en ( $\mu B$ ) des composes $Mn_2CoAl$ et $Mn_2CoGa$ dans les deux structure ( $Cu_2MnAl$ et $Hg_2CuTi$ ).....   | 38 |

## Sommaire

Résumé

Remerciement

List des figures

List des tableaux

Sommaire

Introduction générale 10

### Chapitre 1 : les alliages heusler

1.1. Introduction 13

1.2. Alliages Heusler 13

1.2.1. Alliages full heusler 15

1.2.2. Alliages half Heusler 16

1.2.3. Alliages inverses Heusler 16

1.2.4. Alliages Heusler quaternaires 16

1.3. Structure cristallin 17

1.3.1. Structure cristallin des alliages full heusler 17

1.3.2. Structure cristallin des alliages half heusler 18

1.4. Les demi-métaux 19

1.5. Les applications 20

1.5.1. Magnéto-résistance Géante (GMR) 21

1.5.2. Magnéto-résistance Tunnel (TMR) 22

Références 24

### Chapitre 2 : résultats et discussion

2.1. Introduction 28

2.2. Détails et techniques de calculs 28



|   |    |
|---|----|
| 2.3. Propriétés structurales                          | 28 |
| 2.3.1. Propriétés structurales de matériau $Mn_2CoAl$ | 29 |
| 2.3.2. Propriétés structurales de matériau $Mn_2CoGa$ | 31 |
| 2.4. Propriétés électronique                          | 33 |
| 2.4.1. La structure de bande                          | 33 |
| 2.5. Propriétés magnétique                            | 37 |
| Références  | 39 |
| Conclusion générale                                   | 40 |

## Introduction générale

Grace aux caractéristiques étonnantes des matériaux magnétiques, les chercheurs ont découvert des nouvelles fonctionnalités et technologies formidables, et ont développé des dispositifs électroniques surtout après la découverte de la magnétorésistance qui ouvre la porte devant une nouvelle conception surprenant connue sous le nom de la spintronique, cette dernière est une technique qui exploite les propriétés quantiques du spin des électrons dans le but de traiter et de stocker les informations et pouvoir les retrouver facilement au besoin.

Et puisque l'homme cherche toujours de travailler avec moins d'effort, c'est la nature humaine ; il a développé des logiciels de simulation qui deviennent plus en plus très utilisables dans les études des matériaux, car la simulation est souvent moins chère que l'expérimentation et comporte beaucoup moins de risque lorsque les chercheurs font leurs études, les résultats peuvent être obtenus beaucoup plus rapidement. La simulation aussi permet d'explorer diverses propriétés dans le domaine quantique telles que, les propriétés structurales, électroniques et même dynamiques de la matière loin de toute connaissance expérimentale a priori du système étudié.

Les méthodes ab-initio ont actuellement la possibilité d'effectuer avec une grande précision des calculs pour différentes grandeurs, tels que l'élasticité, les spectres optiques, les fréquences de vibration du réseau etc.... même pour des systèmes très larges. Parmi ces méthodes ab-initio, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) est l'une des plus précises pour calculer la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qui vise à rendre compte de l'état fondamental d'un système, et dont l'application numérique a été rendue possible par Hohenberg, Kohn et Sham dans les années 60 et 70.

Ce mémoire portera sur l'étude comparative de la propriété structural, électronique et magnétique des deux systèmes d'alliages d'Heusler  $Mn_2CoAl$  et  $Mn_2CoGa$  dans les deux structures  $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ , composés de formule chimique  $X_2YZ$ , où X et Y sont des métaux de transition (Mn, Co). En utilisant le code wien2k basé sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT).

Nous avons divisé notre travail en deux chapitres.

- Dans la première partie, 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 qui nous permet de déterminer les propriétés structurelles et électroniques des matériaux.

Enfin, nous terminons par une conclusion générale.

# Chapitre 1 : les alliages heusler

## 1.1. Introduction

La compréhension profonde des propriétés mécaniques et électroniques des matériaux exige l'étude et la connaissance parfaite du milieu physique qui est le siège du déplacement des porteurs de charges, c'est-à-dire connaître la façon sous laquelle les atomes sont placés et disposés. A ce moment, la connaissance des propriétés structurales des matériaux est d'importance capitale dans les calculs pour la prédiction et la compréhension de leurs différentes propriétés physiques de point de vue microscopique. Dans ce chapitre, nous allons classer tous les types d'alliages Heusler apparus depuis 1903 (première découverte de Fritz Heusler) par leurs propriétés structurelles.

## 1.2. Alliages Heusler

En 1903, Fritz Heusler a découvert qu'un alliage avec une formule de type  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  se comporte comme un matériau ferromagnétique, sans avoir aucun élément ferromagnétique comme Fe, Co, Ni et Gd. Ainsi, ce composé connu comme alliage Heusler a été démontré pour former l'antiphase thermique limitée, qui peut être utilisé pour les matériaux à mémoire et réfrigération magnétique. Les alliages Heusler ont ensuite attiré plus d'attention de la communauté spintronique depuis la première prédiction de la demi-métalicité sur un semi-Heusler  $\text{NiMnSb}$  par Groot et al en 1983. Les alliages Heusler sont donc connus pour être l'un des meilleurs ferromagnétiques demi-métalliques dans le but d'atteindre 100% de spin polarisation à température ambiante en raison de leur haute température de curie et de grands moments magnétiques intrinsèques. Afin de mettre en œuvre les alliages Heusler en « spintronique », la demi-métalicité doit être maintenue sous sa forme de film mince. Cela nécessite de surmonter les défis majeurs tels que la formation de la phase entièrement ordonnée et le désordre atomique sur les surfaces [1]. Ce matériau remarquable et ses équivalents, qui comprennent maintenant une vaste collection de plus de 1000 composés, sont maintenant connus comme composés ou alliages Heusler. Ce sont des matériaux semi-conductrices ou métalliques ternaires avec un mélange 1 : 1 : 1 (également connu sous nom "Semi Heusler") ou d'un mélange 2 : 1 : 1 stœchiométrie connu sous le nom du " Full-Heusler". Les propriétés de nombreux composés Heusler peuvent prédire simplement en comptant le nombre d'électrons de valence [2]. Par exemple, les alliages de Heusler non magnétique composés à environ 27 électrons de valence sont supraconducteurs, par contre les semi- conducteurs affichent une autre catégorie importante avec plus de 250 composées et sont considérés comme de nouveaux matériaux pour les énergies solaires. La largeur de gap pour ces semi-conducteurs change de 0-4

eV en changeant leur composition chimique. En effet, d'excellentes propriétés thermoélectriques sont été récemment mises en évidence pour les matériaux à base de TiNiSn [3]. Sur la base des calculs de leurs structures de bandes une nouvelle classe d'alliages Heusler a été prédite appelée isolants topologiques multifonctionnels. C'est un nouvel état de la matière, dans lequel les états de surface sont topologiquement protégés contre la diffusion d'impureté [4, 5]. La grande classe de composés magnétiques  $X_2YZ$  montre toutes sortes de comportement magnétique et les propriétés magnétiques multifonctionnels, tels que magnéto-optiques [6], magnétocalorique [7] et les caractéristiques magnéto-structurelle [8]. L'intérêt majeur de certains alliages d'Heusler peuvent être magnétiques et présenter une structure électronique très différente selon le spin, ainsi la bande de valence de spin majoritaire peut être métallique, alors que la bande de valence de spin minoritaire peut être isolante ou semi-conductrice. Le terme demi-métal est utilisé pour décrire tout matériau ayant cette asymétrie de spin dans les bandes de structure. Les composés Heusler demi métallique à base de  $CO_2$  ont un grand intérêt en raison de leurs températures Curie élevés [9] et sont utilisés aujourd'hui dans les jonctions magnétiques à effet tunnel [10]. Les composés de Heusler ont souvent été compris comme des alliages intermétalliques, bien que la description en tant que composé intermétallique est plus appropriée en raison de leur ordre atomique caractéristique. Le composé Heusler ternaire a une formule générale  $X_2YZ$ , dans laquelle X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Cependant, dans certains cas, Y est remplacé comme un élément de terre rare ou d'un métal alcalinoterreux. 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.

Les combinaisons possibles des éléments pouvant former ces matériaux peuvent être regroupés dans la figure I.1. En effet, un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison de différents éléments selon le schéma de couleurs.

**X<sub>2</sub>YZ Heusler compounds**

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

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

### 1.2.1. Alliages full heusler

Alliages full-Heusler : Les alliages full Heusler ont une composition de type X<sub>2</sub>YZ, où X et Y sont des métaux de transition, et Z représente les éléments non magnétiques du groupe III, IV ou V du tableau périodique. En général, les alliages Heusler cristallisent dans la structure Cu<sub>2</sub>MnAl, les atomes X occupent les sites (0,0,0) et (1/2,1/2,1/2), l'atome Y occupe le site (1/4,1/4,1/4), et l'atome de Z occupe le site (3/4,3/4, 3/4), voir figure I.6. Si le nombre atomique de l'atome Y est supérieure à celui de X appartenant à la même période, alors la structure inverse Hg<sub>2</sub>CuTi est observée, les atomes X occupent les site (0, 0, 0) et (1/4,1/4,1/4), l'atome Y occupe le site (12,1/2,1/2) et l'atome de Z occupe le site (0.75, 0.75, 0.75) [11].

### 1.2.2. Alliages half Heusler

Les alliages de cette famille ont la formule générale XYZ de même composition, ou X est souvent un métal de transition comme Cu, Ni ou Co, Y est souvent Mn ou Fe, et Z est souvent un semi-conducteur. Ils cristallisent dans une structure cubique (C1b) qui peut être dérivée de la structure tétraédrique de type ZnS par un remplissage des sites octaédriques du réseau. Ce type de structure peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont chacun est occupée par les atomes X, Y et Z. Les positions occupées sont respectivement (0,0,0), (1/4,1/4,1/4) et (3/4,3/4,3/4) [11].

### 1.2.3. Alliages inverses Heusler

Les Full-Heusler inverses ont la formule  $X_2YZ$  où la valence de l'atome du métal de transition X est plus petite que celle de Y. Comme conséquence, les composés inverses Heusler cristallisent dans la structure dite  $X_A$  ou  $X_\alpha$ , où la séquence des atomes est X-X-Y-Z et le prototype est  $Hg_2TiCu$  [12]. Plusieurs Heusler inverses ont été étudiés en utilisant des calculs de structure électronique de premier-principe [13,14]. Dans tous les cas, la structure  $X_A$  est énergétiquement préférée par rapport à la structure  $L2_1$  des composés Full-Heusler habituels où la séquence des atomes est X-Y-X-Z. Ce dernier a également été confirmé par des expériences sur  $Mn_2CoGa$  et  $Mn_2CoSn$  films ainsi que des échantillons  $Mn_3Ga$  dopés au Co [15, 16], mais des expériences sur  $Mn_2NiSb$  révèlent que l'arrangement réel des atomes sur les différents sites peut être influencé par la méthode de préparation [17]. Les Heusler inverses sont devenus plus intéressants depuis leurs utilisations en combinant la croissance cohérente sur les semi-conducteurs avec de grandes températures de Curie qui peuvent dépasser les  $1000^\circ K$  comme dans le cas de  $Cr_2CoGa$  [18]. Plusieurs de ces composés ont été identifiés comme étant des aimants demi-métalliques. L'apparence de la demi-métallicité est associée dans tous les cas à un comportement Slater-Pauling du moment total spin-magnétique.

### 1.2.4. Alliages Heusler quaternaires

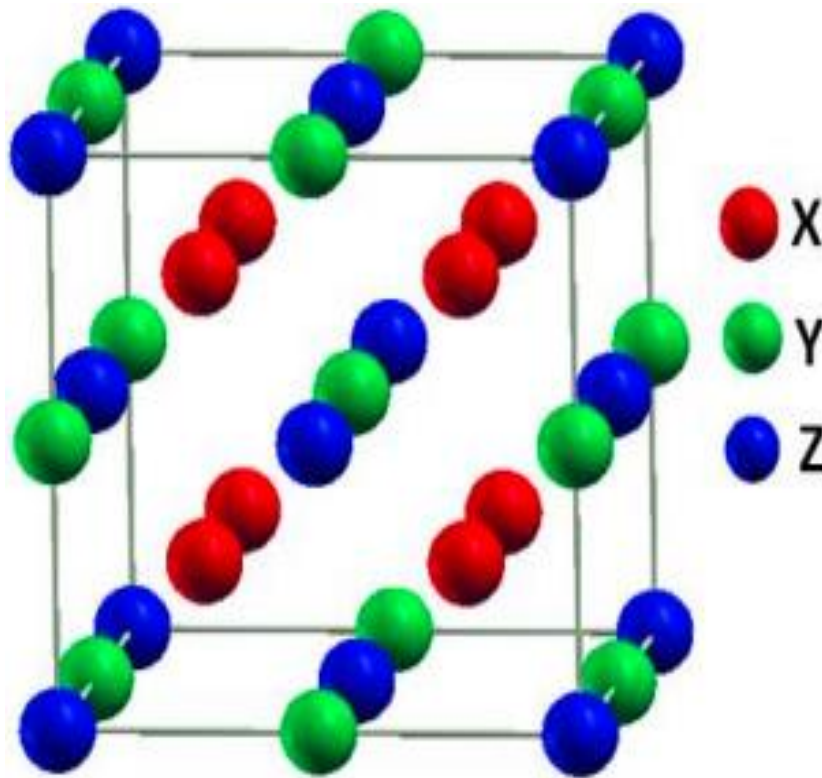
Une autre famille de Heusler de type  $LiMgPdSn$ , également connue sous le nom de composés Heusler de type  $LiMgPdSb$  [19] appelés Heusler quaternaires. Ce sont des composés quaternaires de formule chimique  $(XX')YZ$  où X, X' et Y sont des atomes de métaux de transition. La valence de X' est plus basse que la valence de X, et la valence de l'élément Y est inférieure à la valence des deux X et X'. La séquence des atomes le long de la diagonale du cube à face centré (CFC) est X-Y-X'-Z qui est énergétiquement la plus stable [20].



### 1.3. Structure cristallin

#### 1.3.1. Structure cristallin des alliages full heusler

Selon le groupe d'espace Fm-3m (groupe d'espace N 225) les alliages Heusler de type  $X_2YZ$  se cristallisent avec  $Cu_2MnAl$  noté souvent ( $L2_1$ ) comme prototype [21, 22, 23, 24], la position 8c ( $1/4, 1/4, 1/4$ ) est occupée par les atomes X, quant aux position 4a (0, 0, 0) et 4b ( $1/2, 1/2, 1/2$ ) sont occupées par les atomes Y et Z, la structure  $L2_1$ , se constitue de quatre sous-réseaux cfc interpénétrés, dont deux parmi eux sont occupés par l'atome X



**Fig. 1. 2.** La structure Heusler  $L2_1$  (Full-Heusler).

Dans ce cas, la structure de type NaCl est formée à partir des element Y (moins électropositif) et Z (plus électropositif) qui occupent les sites octaédriques, quant à la structure ZnS, celle-ci est formée par les sites tétraédriques réservés aux atomes X.

En déplaçant les arêtes des cellules unitaires de l'alliage Heusler de ( $1/4, 1/4, 1/4$ ) par rapport à la cellule Fm-3m, la structure  $L2_1$ , illustrée dans la figure 1.2 peut être considérée comme une superstructure CsCl, parfois, il existe les exceptions où l'ordre de classement est

relatif à l'échelle de l'électronégativité, on peut considérer que la combinaison de deux alliages binaire d'une structure CsCl forme un composé Heusler [25].

### 1.3.2. Structure cristallin des alliages half heusler

La famille de ce type se compose selon une stœchiométrie de 1 :1 :1 dont la formule est XYZ et cristallisent dans une structure cubique non-centrosymétrique (groupe d'espace N° 216, F-43m) connue sous la structure C1<sub>b</sub>, cette dernière, est l'équivalent d'un sous réseau ZnS avec les positions 4a et 4c, dont les sites octaédrique 4b sont occupés [26]. L'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes X, Y, Z [26], ce cas de figure caractérise ce type de structure. Les positions de Wyckoff sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2,1/2,1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4)

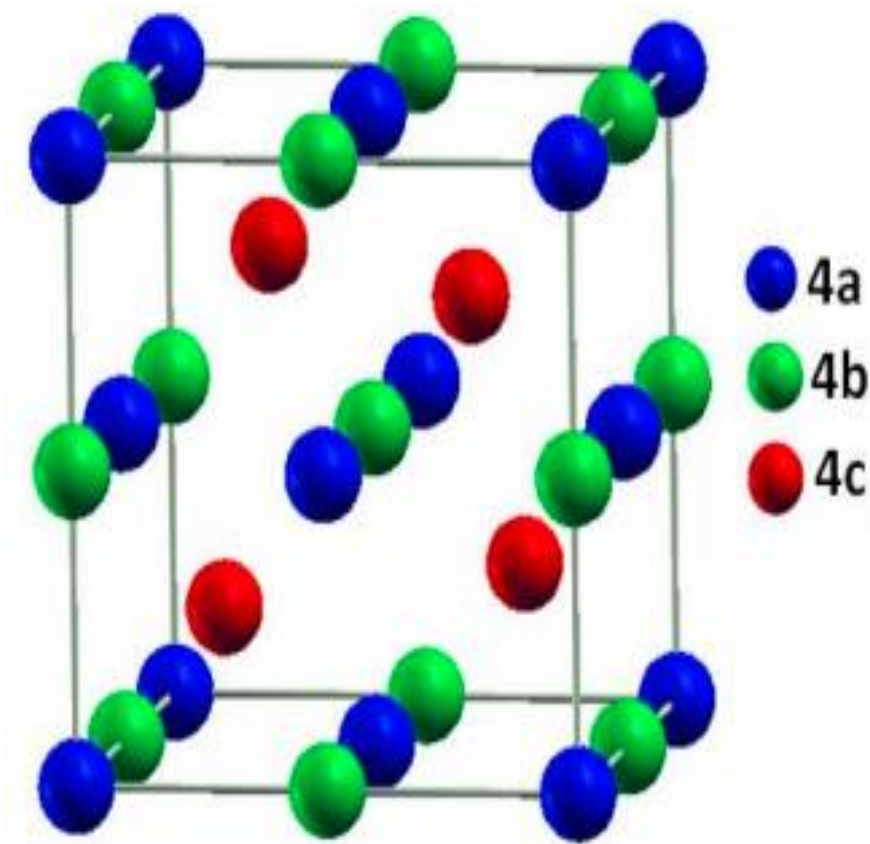


Fig. 1. 3. Structure de demi-Heusler (Half-Heusler)

Trois arrangements atomiques non équivalents à ce type de structure ( $C1_b$ ) peuvent être associés, le Tableau présente ces différentes possibilités.

**Tableau 1.1.** Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type  $C1_b$ .

| Les atomes                   | X  | Y  | Z  |
|------------------------------|----|----|----|
| 1 <sup>er</sup> arrangement  | 4a | 4b | 4c |
| 2 <sup>ème</sup> arrangement | 4b | 4c | 4a |
| 3 <sup>ème</sup> arrangement | 4c | 4a | 4b |

Les arrangements atomiques cités précédemment, dépendent de deux facteurs, l'un est la différence de taille entre les atomes, alors que l'autre est de type des interactions interatomiques.

Souvent, la structure  $C1_b$  est détaillée par le prototype MgAgAs, mais la plupart des alliages demi-Heusler n'ont pas de coïncidence avec ce prototype, la majorité des alliages demi-Heusler contiennent deux éléments de transition, qui sont souvent cités dans la littérature par le prototype MgAgAs [27].

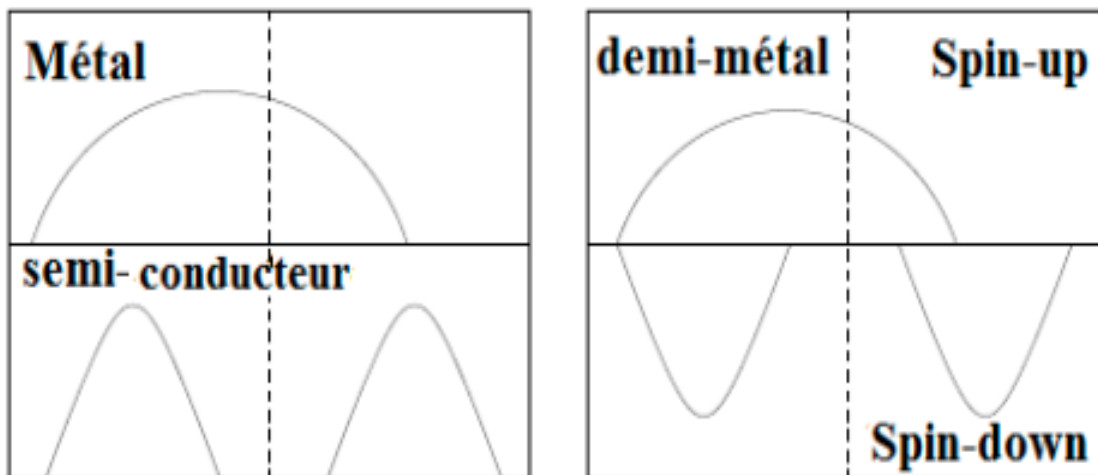
Il faut préciser que ce matériau MgAgAs cristallise en effet avec un ordre atomique autre que la plupart des autres composés demi-Heusler, le ce fait, une situation exceptionnelle se présente dans le prototype lui-même dont MgCuSb est l'exemple [27,28].

#### 1.4. Les demi-métaux

Le terme de demi-métallicité a été introduit pour la première fois par Groot et al [29]. Les matériaux demi-métalliques sont métalliques pour une direction de spin (up ou down) et en même temps semi-conducteurs pour l'autre direction de spin, le matériau ferromagnétique conventionnel présente une densité d'états électroniques au niveau de Fermi pour les électrons de spin majoritaires (up :  $N_{EF} \uparrow$ ) et de spin minoritaires (down :  $N_{EF} \downarrow$ ). On peut alors définir la polarisation  $P$  en spin, qui mesure l'asymétrie en spin, par l'expression :

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

Les matériaux demi-métalliques ont une polarisation en spin de 100% et des propriétés de conduction complètement différentes entre spins minoritaires et spins majoritaires. Le décalage des bandes se traduit par un plus grand nombre de moments magnétiques électroniques dans une direction et donc par une aimantation spontanée. Il en résulte aussi que les électrons de spin majoritaire et ceux de spin minoritaire conduisent le courant en parallèle avec des mobilités différentes, c'est la base générale des effets d'électronique de spin. Une représentation schématique de la densité d'états d'un demi-métal par rapport à un métal et un semi-conducteur est représentée sur la figure 1.4.



**Fig. 1.4.** Représentation schématique de la densité d'états d'un métal, d'un semiconducteur et d'un demi-métal [30].

### 1.5. Les applications

Les applications Tout d'abord commencer en 1988, année de la découverte de la magnétorésistance géante par les équipes d'Albert Fert [31] et de Peter Grunberg [32], et pour laquelle le prix Nobel de Physique 2007 leur a été attribué. Cet effet était observé dans une structure composée des multicouches ferromagnétiques et il est réellement le point de départ de la spintronique qui peut se décrire comme une électronique qui contrôle non seulement la charge, mais aussi le spin des électrons, simultanément afin de traiter et sauvegarder les informations. Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott en 1936 [33], a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60 [34, 35]. Aujourd'hui la spintronique possède des

applications importantes, les plus répandues étant la lecture des disques durs par la magnétorésistance géante (GMR), la magnétorésistance tunnel (TMR : Tunnel Magneto Resistance) et l'écriture des mémoires magnétiques (MRAM : Magnetoresistive Random Access Memories) dans nos ordinateurs.

### 1.5.1. Magnétorésistance Géante (GMR)

Magnétorésistance Géante (GMR) La magnétorésistance est un phénomène qui a été découvert en 1857 par William Thomson elle correspond à la variation de la résistance électrique en présence d'un champ magnétique à la fin des années 1980, soit après 130 ans de recherches théoriques et applications relatives à la magnétorésistance, de tels appareils de mesure, détecteurs, et capteurs ont vu le jour après cette découverte. L'effet GMR est un effet quantique qui est observé dans un empilement de type Ferro/Métal/Ferro [2]. 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.



**Fig. 1.5.** Les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.

L'effet GMR correspond à une différence de résistance électrique suivant l'orientation relative des aimantations dans les deux électrodes où la résistance au passage des électrons d'une électrode à l'autre est plus élevée si les deux électrodes ont leur aimantation antiparallèle l'une par rapport à l'autre que si leur aimantation est parallèle.

### 1.5.2. 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 [2], ce n'est qu'à partir de 1995, assiste par les travaux de Moodera et al sur des empilements Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ CoFe, que la TMR a connu un regain d'intérêt. La TMR a une structure semblable à celle des vanes 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 1,5nm) 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. 1.6.** 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) [36, 37, 38], 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 leurs applications dans des dispositifs, donc un atout décisif pour accroître l'autonomie de toutes les applications électroniques, les ordinateurs portables par exemple.

**Références**

- [1] C. Felser, A. Hirohata, Heusler Alloys Properties, Growth, Applications, Springer, New York, 2016.
- [2] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, *Angew Chem Int Ed* 46 (2007) 668.
- [3] S. Sakurada, N. Shutoh, *Appl Phys Lett* 86 (2005) 082105.
- [4] S. Chadov, X. Qi, J. Kübler, G.H. Fecher, C. S. Felser, S. C. Zhang, *Nat. Mat* 9 (2010) 541.
- [5] H. Lin, A. Wray, Y. Xia, S. Xu, S. Jia, R.J. Cava, *Nat Mat* 9 (2010) 546.
- [6] P. G. Van Engen, K.H. J. Bushow, R. Jongebreur, M. Erman, *Appl Phys Lett* 42 (1983)202.
- [7] T. Krenke, E. Duman, M. Acet, E.F. Wassermann, X. Moya, L. Manosa, *Nat Mat* 4 (2005) 450.
- [8] R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, H. Morito, S. Okamoto, O. Kitakami, *Nature* 439 (2006) 957.
- [9] S. Wurmehl, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H.J. Lin, *Appl Phys Lett* 88 (2006) 032503.
- [10] W. Wang, E. Lui, M. Kodzuka, H. Sukegawa, M. Wojcik, E. Jedryka, *Phys Rev B* 81 (2010) 140402.
- [11] C. Felser, G.H. Fecher, *spintronics*, springer (2013)
- [12] Le magazine d'information de l'université Paris-Sud, janvier- février 2008 numéro 69.
- [13] K. Zdogan, Ü. I. Galanakis, *J. Magn. Magn. Mater.* 321, L34 (2009)
- [14] E. Bayar, N. Kervan, S. Kervan, *J. Magn. Magn. Mater.* 323, 2945 (2011)
- [15] J. Winterlik, G.H. Fecher, B. Balke, T. Graf, V. Alijani, V. Ksenofontov, C.A. Jenkins, O. Meshcheriakova, C. Felser, G. Liu, S. Ueda, K. Kobayashi, T. Nakamura, M. W—jcik, *Phys. Rev. B* 83, 174448 (2011)
- [16] V. Alijani, J. Winterlik, G.H. Fecher, C. Felser, *Appl. Phys. Lett.* 99, 222510 (2012)
- [17] H. Luo, W. Zhu, L. Ma, G. Liu, Y. Li, X. Zhu, C. Jiang, H. Xu, G. Wu, *J. Phys. D Appl. Phys.* 42, 095001 (2009)
- [18] I. Galanakis, E. Saüsöoglu, *Appl. Phys. Lett.* 99, 052509 (2011)



- [19] D. Xu, G. Liu, G.H. Fecher, C. Felser, Y. Li, H. Liu, J. Appl. Phys. 105, 07E901 (2009)
- [20] V. Alijani, J. Winterlik, G.H. Fecher, S.S. Naghavi, C. Felser, Phys. Rev. B 83, 184428 (2011)
- [21] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG 5 (1903) 220.
- [22] F. Heusler, Verh DPG 5 (1903) 219.
- [23] O. Heusler, Ann Phys 19 (1934) 155.
- [24] A.J. Bradley, J.W. Rodgers, Proc Roy Soc A 144 (1934) 340.
- [25] W.H. Butler, C.K.A. Mewes, C. Liu, T. Xu, arXiv: vol 1 (2011) 3855
- [26] P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, Landolt-Börnstein - group III condensed matter, vol. 19C. Berlin: Springer; 19 (1988) 75-184.
- [27] P. Villars, L.D Calvert. Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases. American Society of Metals; vol 1-3 (1991) 3258.
- [28] H. Nowotny, W. Sibert, Z. Metallkunde 33 (1941) 391.
- [29] R. A. de Groot and F. M. Mueller, Phys. Rev. Lett., vol. 50, no. 25, (1983).
- [30] I. Galanakis, P. Dederichs, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B, vol. 66, no. 17, (2002).
- [31] M.N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, Phys Rev Lett 61 (1988) 2472.
- [32] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, H. Sowers, Phys Rev Lett 57 (1986) 2442.
- [33] N. F. Mott, Proc Roy. Soc. A153 (1936)699.
- [34] A. Fert et I. A. Campbell, Phys. Rev. Lett. 21 (1968) 1190, J. physique 32 (1978), C1 46, J. phys. F.6(1976)849.
- [35] B. Loegel, F. Gautier, J. phys. Chem. Sol.32(1971) 2723
- [36] K. Inomata, S. Okamura, R. Goto, N. Yezuka, Jpn J Appl Phys 42 (2003) L419.
- [37] S. Kämmerer, A. Thomas, A. Hütten, G. Reiss, Appl Phys Lett 85 (2004) 79.

[38] C. Herbot, E.A. Jorge, M. Jordan, Appl Phys Lett 94 (2009) 142504.

# Chapitre 2 : résultats et discussion

## 2.1. Introduction

À l'égard des développements récents dans la physique de la matière condensée, beaucoup d'efforts ont été déployés afin d'obtenir des bons résultats pour une meilleure compréhension du comportement des matériaux. Et pour cela, la simulation joue un rôle très important dans les études des propriétés des matériaux, son intérêt est de minimiser les dépenses des expériences coûteuses, dangereuses ou même inaccessibles au laboratoire, et elle permet aussi de modéliser les phénomènes difficiles ou impossibles à réaliser expérimentalement [1]. Parmi ces méthodes de simulation, on a utilisé la méthode LAPW [2, 3, 4] implémentée dans le code Wien2k [5]

En rappelant que les alliages d'Heusler ont connu un grand intérêt technologique et qu'ils sont une base de nombreuses applications en spintronique. Plusieurs recherches ont été fixées sur cette famille, où les alliages full Heusler forment une partie, ils sont définis par la formule  $X_2YZ$ .

Ce dernier chapitre contient les résultats et leurs interprétations lors des études approfondies faites sur les propriétés structurales et électroniques des alliages Heusler  $Mn_2CoZ$  ( $Z = Al, G$ ).

## 2.2. Détails et techniques de calculs

Dans ce travail, les calculs ont été effectués en utilisant le code Wien2k [4], qui est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées LAPW dans le cadre de la DFT [6], ainsi le potentiel d'échange et de corrélation est décrit par l'approximation du gradient généralisé (GGA) paramétrée par Perdew, Burke, et Ernzerhof [7].

## 2.3. Propriétés structurales

Dans le but de déterminer les constantes structurales telles que le module de compressibilité, sa première dérivée et le paramètre de réseau à l'équilibre, on calcule l'énergie totale pour une seule valeur du paramètre de réseau  $a$ . Les paramètres du réseau de l'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume, en utilisant l'équation de Murnaghan [8] donnée par :

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

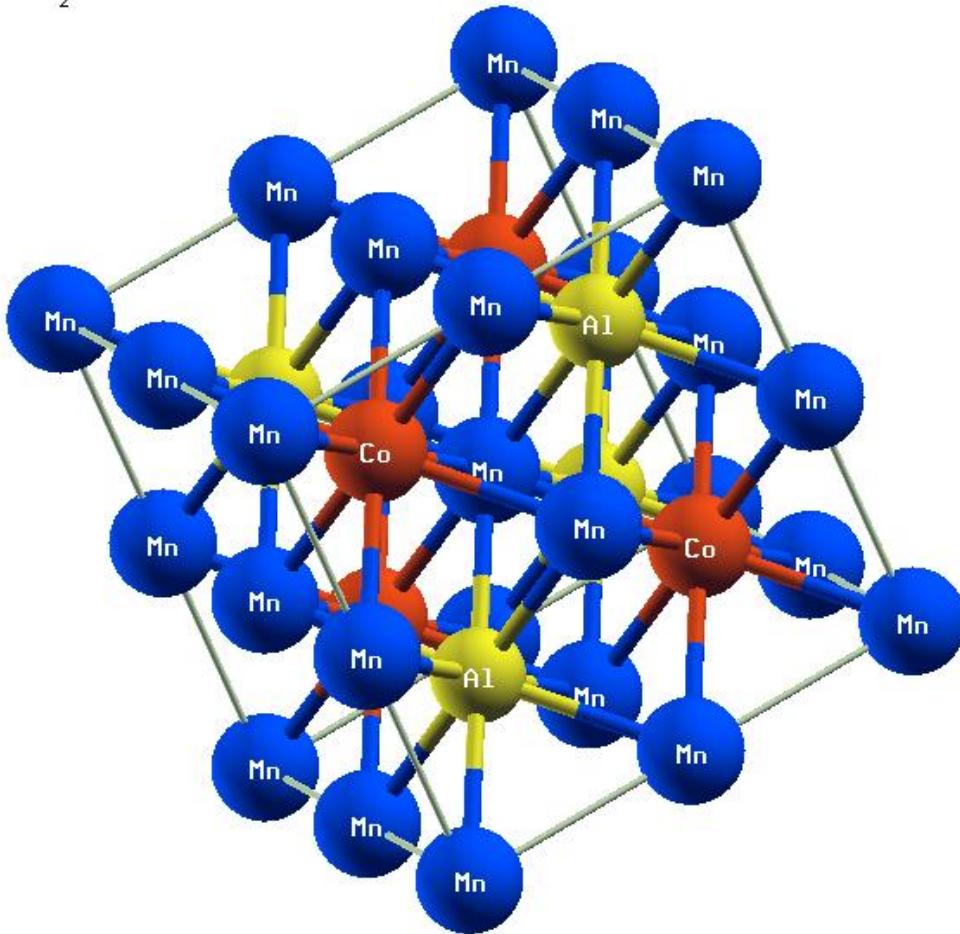
Le paramètre du réseau de l'équilibre est donné par le minimum de la courbe  $E_{tot}(a)$  et le module de compressibilité  $B$  est déterminé par :

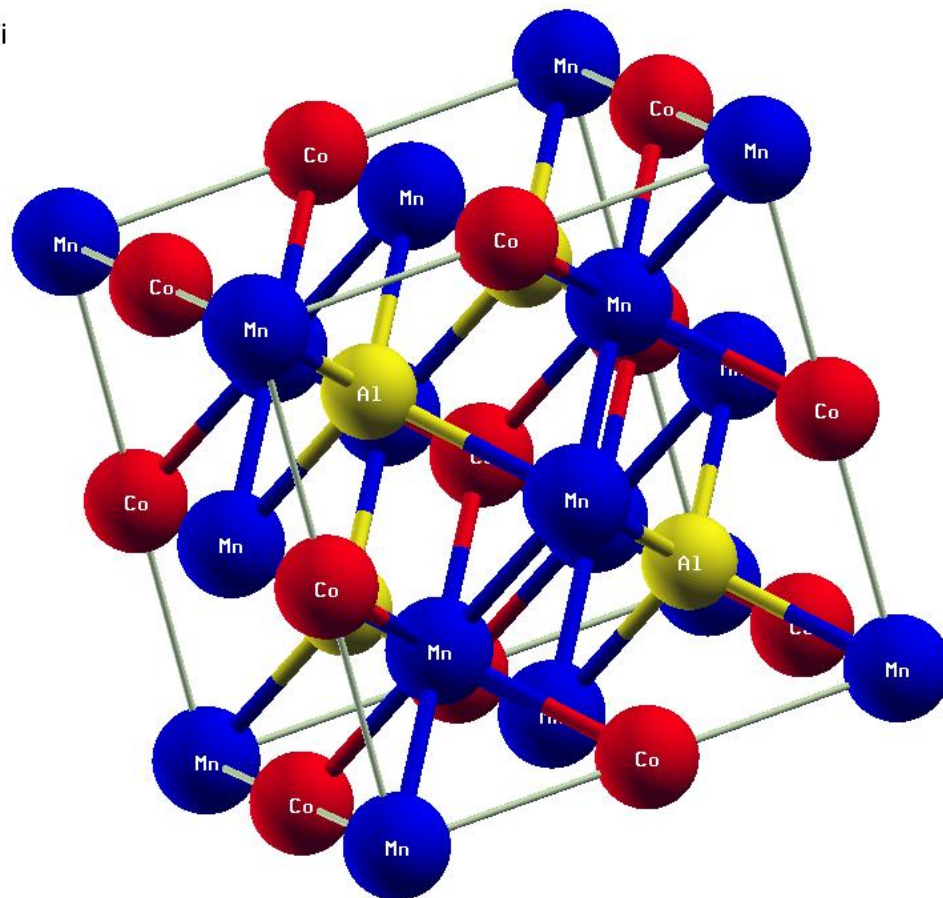
$$B = V \frac{\delta^2 E}{\delta V^2} \quad (2.02)$$

### 2.3.1. Propriétés structurales de matériau $\text{Mn}_2\text{CoAl}$

Notre objectif dans cette section est de trouver la structure la plus stable parmi les deux structures du composé  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$  qui sont  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  et  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  (voir figure 2.1).

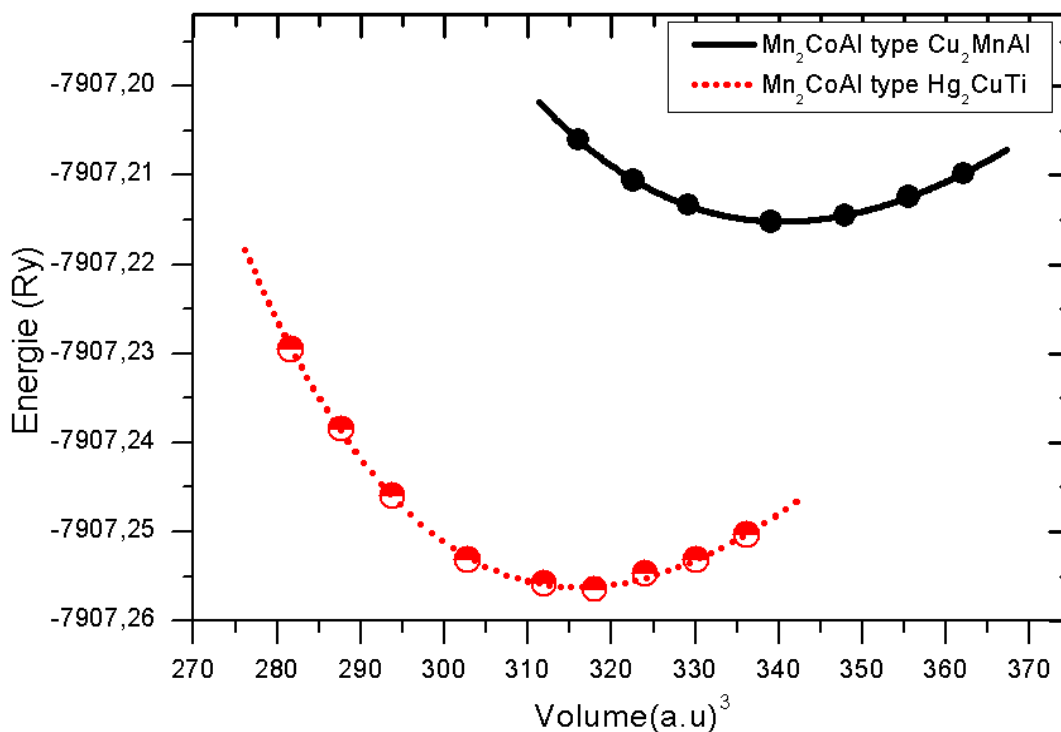
type  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$



type  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ 

**Fig. 2.1.** Structure cristalline du composé  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$ , ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  et  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  respectivement).

La figure 2.2 Représentent la variation de l'énergie totale en termes de volume. Les résultats montrent que la structure de type  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$  est énergétiquement plus stable que la structure de type  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ . Où le paramètre de réseau  $a_0$ , le module de compressibilité d'équilibre  $B_0$ , le volume de la maille élémentaire expérimentale  $V_0$  et  $B'_0$  est la dérivée du module de compressibilité au volume d'équilibre, et finalement l'énergie totale minimal  $E_0$  sont illustrés dans le tableau 2.1.



**Fig. 2.2.** La variation de l'énergie totale en termes de volume du composé  $Mn_2CoAl$ , ( $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ ).

**Tableau 2.1.** Constante de réseau optimisée  $a_0$ , module de compressibilité  $B$ , dérivées de module de compressibilité  $B'$ , énergie totale  $E_0$  et le volume de la maille élémentaire du composé  $Mn_2CoAl$ .

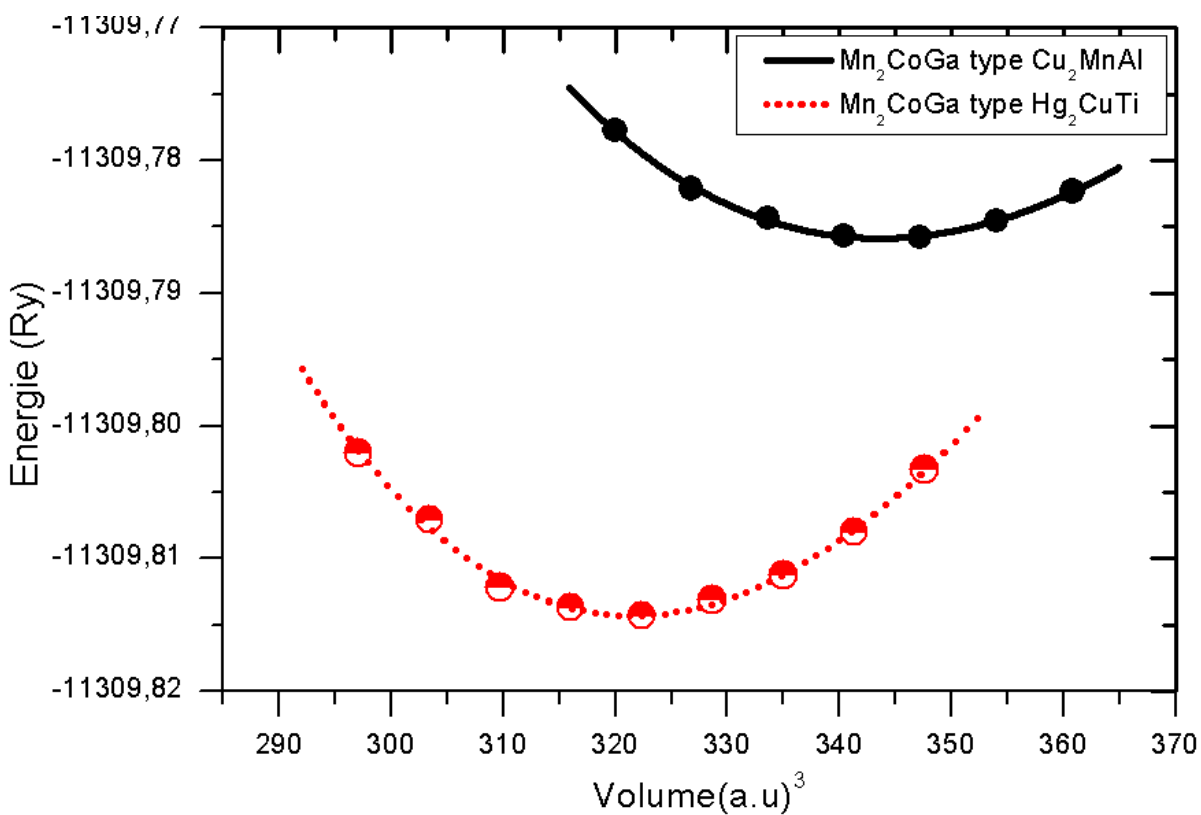
| Composé                      | $a_0$ (Å) | $B$ (GPa) | $B'$   | $V_0$ (a.u.) <sup>3</sup> | $E_0$ (Ry) |
|------------------------------|-----------|-----------|--------|---------------------------|------------|
| $Mn_2CoAl$<br>( $Cu_2MnAl$ ) | 5.8653    | 131.6887  | 5.3679 | 340.4078                  | -7907.2151 |
| $Mn_2CoAl$<br>( $Hg_2CuTi$ ) | 5.7222    | 159.5507  | 5.9140 | 316.1095                  | -7907.2561 |

### 2.3.2. Propriétés structurales de matériau $Mn_2CoGa$

Le même but est étendu dans cette section à laquelle dit qu'il faut trouver la structure stable mais cette fois pour le composé  $Mn_2CoGa$ . Comme le composé précédent, la figure 2.3 montre que la structure  $Hg_2CuTi$  est énergétiquement plus stable que la structure  $Cu_2MnAl$ . Tandis que le tableau 2.2 représente certains facteurs structurels des deux structures du composé  $Mn_2CoGa$ .

**Tableau 2.2.** Constante de réseau optimisée  $a_0$ , module de compressibilité B, dérivées de module de compressibilité B', énergie totale  $E_0$  et le volume de la maille élémentaire du composé  $Mn_2CoGa$ .

| Composé                      | $a_0$ (Å) | B (GPa)  | B'     | $V_0$ (a.u.) <sup>3</sup> | $E_0$ (Ry) |
|------------------------------|-----------|----------|--------|---------------------------|------------|
| $Mn_2CoGa$<br>( $Cu_2MnAl$ ) | 5.8834    | 129.9066 | 4.0187 | 343.5683                  | -11309.785 |
| $Mn_2CoGa$<br>( $Hg_2CuTi$ ) | 5.7549    | 172.3245 | 3.9150 | 321.5465                  | -11309.814 |



**Fig. 2.3.** La variation de l'énergie totale en termes de volume du composé  $Mn_2CoGa$ , ( $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ ).



## 2.4. Propriétés électronique

L'étude des propriétés électroniques d'un matériau nous permet d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau comme l'énergie de gap et la distribution de charges. Pour les systèmes magnétiques, en utilisant le concept des électrons à spin-up et spin-down séparément, on effectue les calculs à spins polarisés en procédant à l'analyse des propriétés données par la structure de bande.

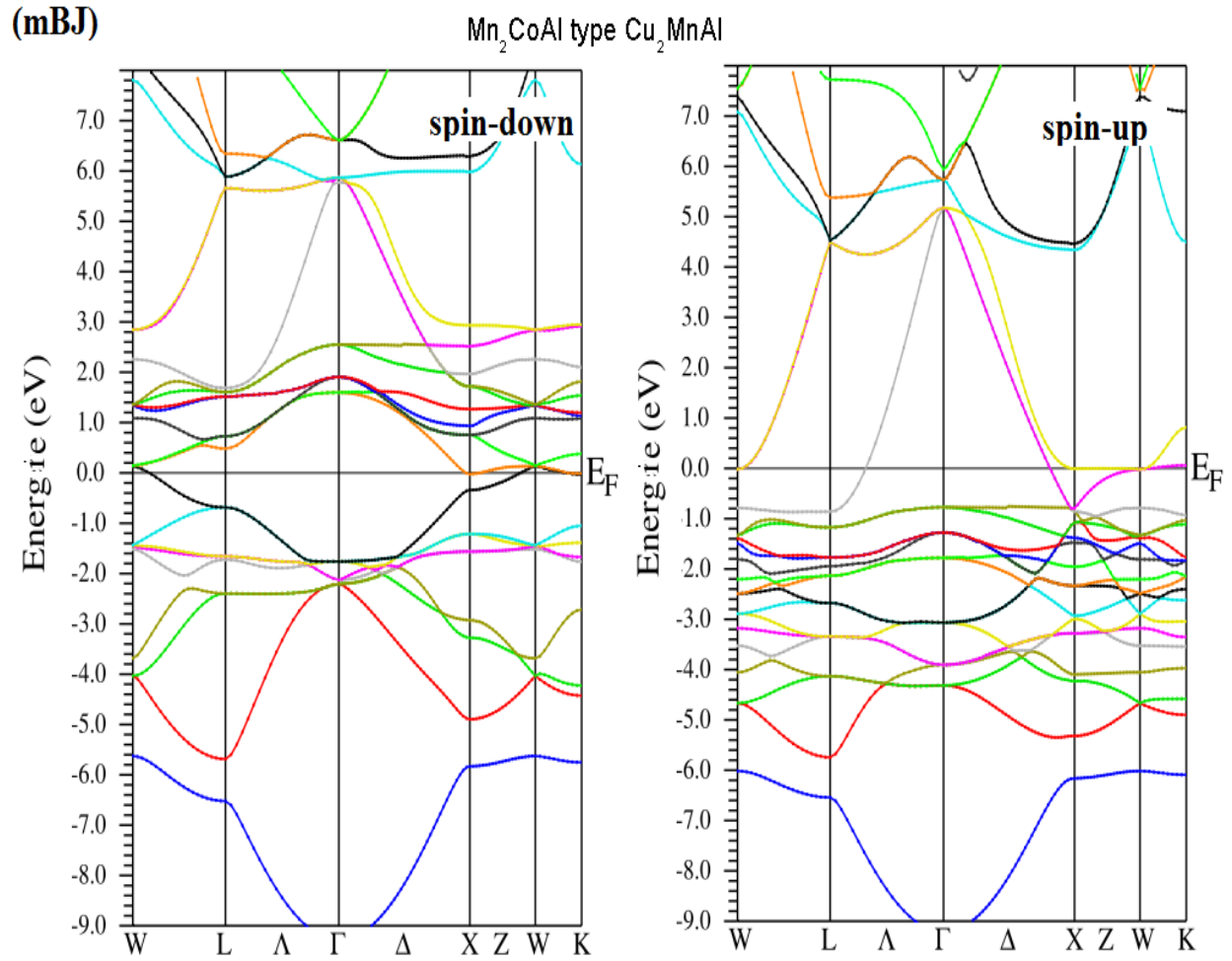
### 2.4.1. La structure de bande

La théorie des bandes est un modèle quantique en physique des solides qui détermine les valeurs possibles que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci de façon générale. Ces électrons n'ont pas la possibilité d'avoir que des valeurs énergétiques comprises dans certains intervalles lesquels sont séparés par des bandes d'énergie interdites. Cette modélisation conduit à parler de bandes d'énergie ou de structure des bandes.

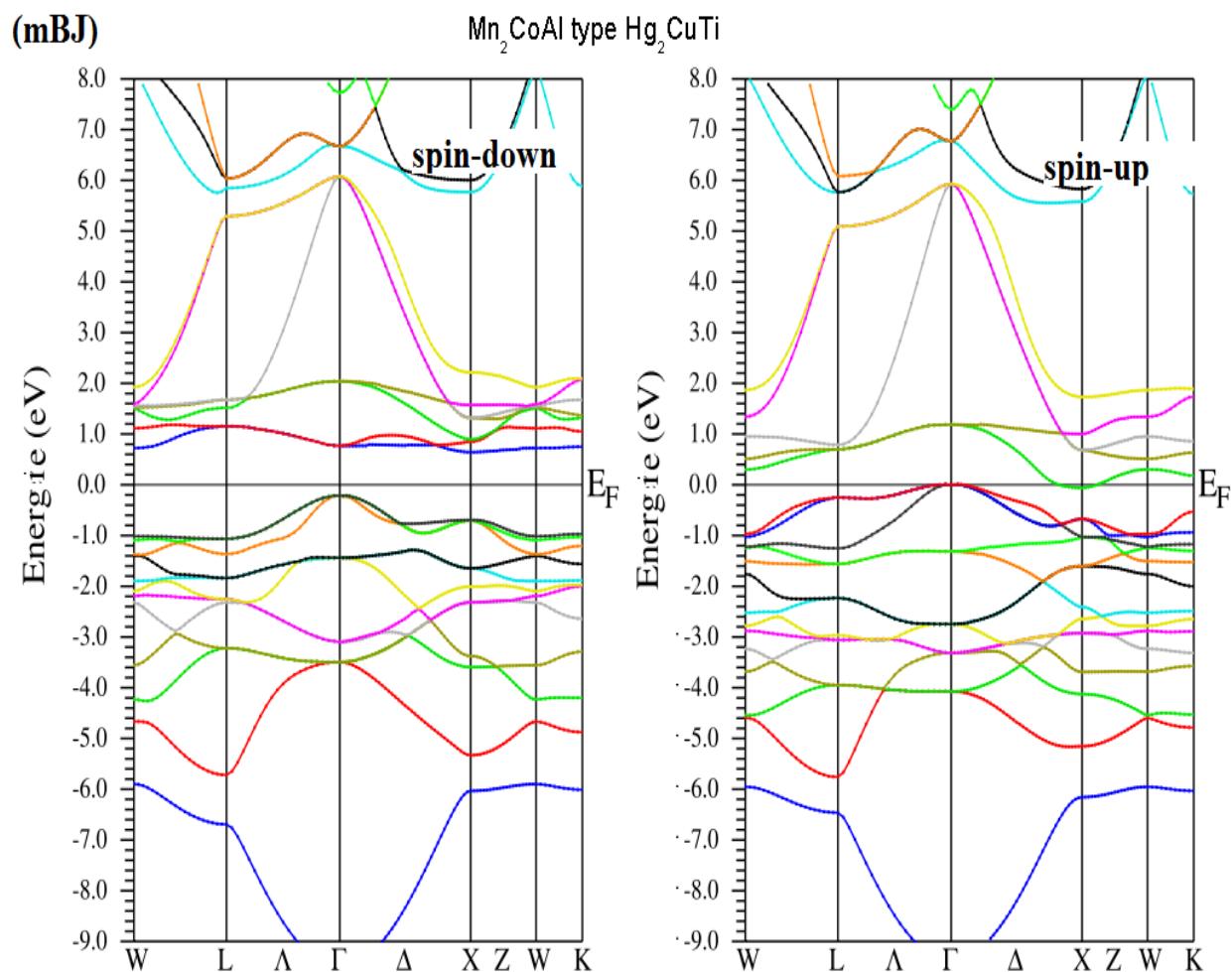
Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible de comprendre et d'expliquer schématiquement les différents comportements entre un isolant, un semi-conducteur, un conducteur et un métal.

#### ➤ **Composé $Mn_2CoAl$**

Les structures de bandes des deux structures ( $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ ) de l'alliage heusler  $Mn_2CoAl$  illustrées dans les figures (2.4 et 2.5), en tenant compte du calcul spin-polarisé.



**Fig. 2.4.** La structure de bande de l'alliage  $Mn_2CoAl$  type  $Cu_2MnAl$ .



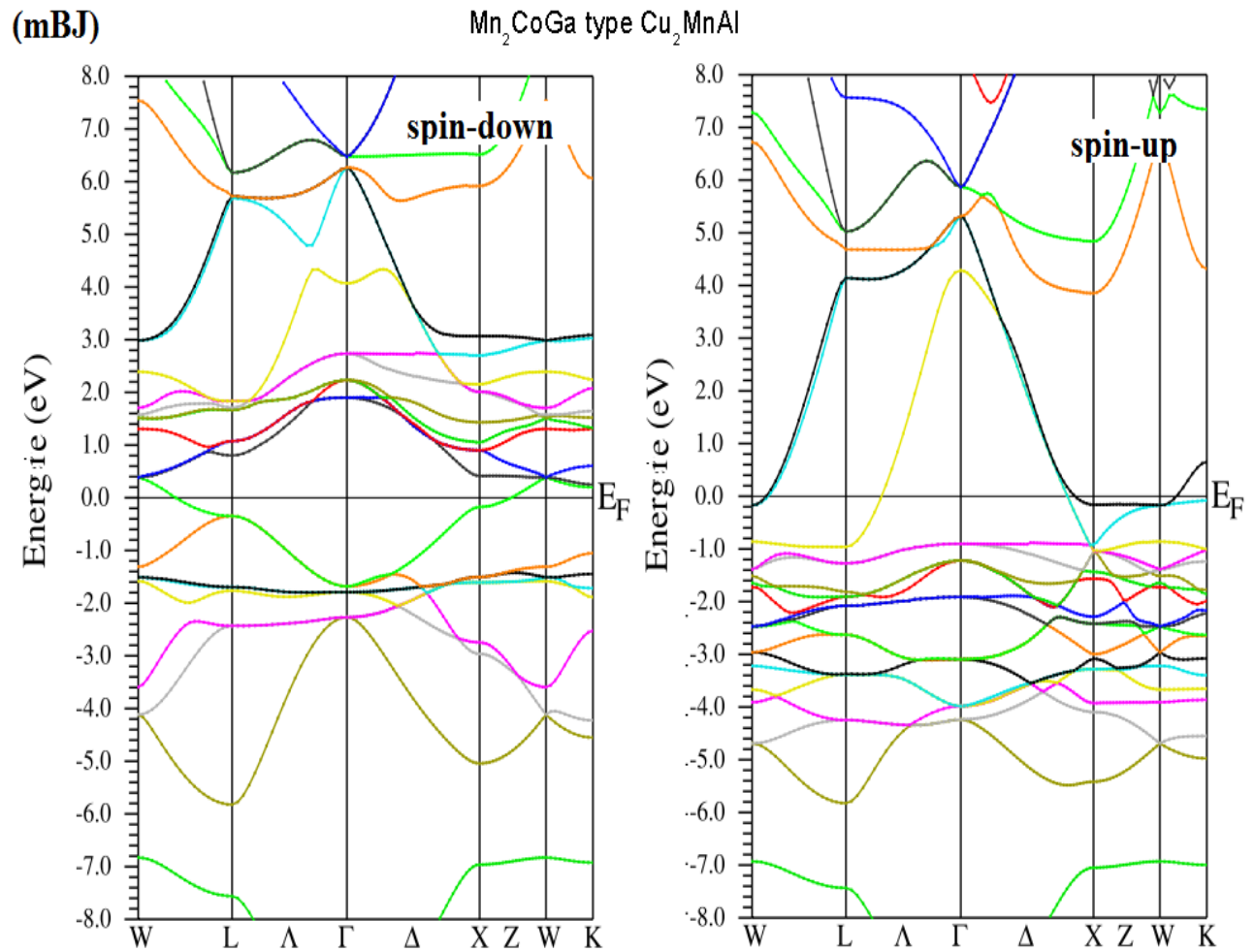
**Fig. 2.5.** La structure de bande de l'alliage  $Mn_2CoAl$  type  $Hg_2CuTi$ .

Nous observons que les structures de bandes de spins majoritaires (spin-up) et de spins minoritaires (spin-down) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi, pour la structure  $Cu_2MnAl$  de notre composé ce qui confirme le caractère métallique de ce composé.

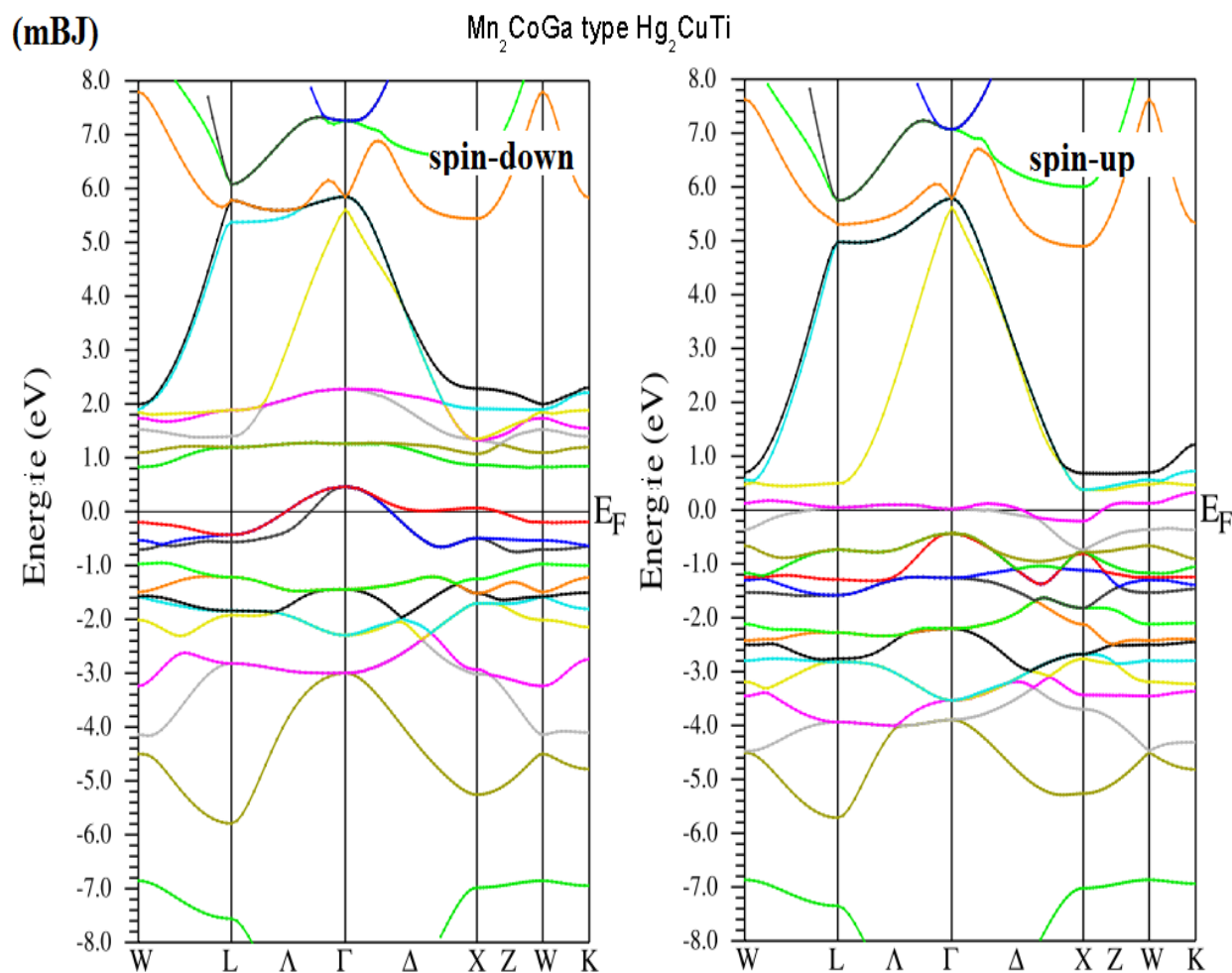
De l'autre côté on voit que le structure de bandes de spins majoritaires (spin-up) pour la structure  $Hg_2CuTi$  de notre composé contient un chevauchement au niveau de Fermi et le structure de bandes de spins minoritaires (spin-down) pour la même structure ( $Hg_2CuTi$ ) contient un gap d'énergie sépare la bande de valence et le bande de conduction, ce qui signifie que cette structure a un comportement demi-métallique.

➤ **Composé Mn<sub>2</sub>CoGa**

Les structures de bande des deux structures (Cu<sub>2</sub>MnAl et Hg<sub>2</sub>CuTi) de l'alliage heusler Mn<sub>2</sub>CoGa représentées sur les figures (2.6 et 2.7), en tenant compte du calcul polarisé en spin.



**Fig. 2.6.** La structure de bande de l'alliage Mn<sub>2</sub>CoGa type Cu<sub>2</sub>MnAl.



**Fig. 2.7.** La structure de bande de l'alliage  $Mn_2CoGa$  type  $Hg_2CuTi$ .

Les deux structures de ce composé ( $Mn_2CoGa$ ) se caractérisent par un chevauchement des bandes de valence et de conduction. La remarque la plus importante est la présence d'états électroniques au niveau de Fermi dans la structure de bandes des électrons à spin-up et celle des électrons à spin-down. Ce qui signifie que les deux structures sont à caractères métalliques pour les deux orientations de spin.

## 2.5. Propriétés magnétique

Le tableau 2.3 suivant regroupe les résultats et valeurs obtenues pour le moment magnétique total et local en ( $\mu_B$ ) à l'équilibre pour les composés  $Mn_2CoZ$  ( $Z = Al, Ga$ ) dans les deux structure ( $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ )

**Le tableau 2.3.** Le moment magnétique total et local en ( $\mu\text{B}$ ) des composés  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$  et  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$  dans les deux structures ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  et  $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ).

| Composé  | $M_{\text{tot}}$ | $M_{\text{Mn}}$ | $M_{\text{Co}}$ | $M_{\text{Al}}$ |
|--|------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| $\text{Mn}_2\text{CoAl}$<br>( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ) | 7.8097           | 2.97502         | 1.74149         | -0.06226        |
| $\text{Mn}_2\text{CoAl}$<br>( $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) | 2.04912          | 2.46309         | 1.01184         | -0.02738        |
| Composé  | $M_{\text{tot}}$ | $M_{\text{Mn}}$ | $M_{\text{Co}}$ | $M_{\text{Ga}}$ |
| $\text{Mn}_2\text{CoGa}$<br>( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ) | 7.70698          | 2.89665         | 1.71230         | -0.04777        |
| $\text{Mn}_2\text{CoGa}$<br>( $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) | 3.77302          | 1.80164         | 1.15430         | -0.04790        |

Pour les trois cas ( $\text{Mn}_2\text{CoAl}$  ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ),  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$  ( $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ ) et  $\text{Mn}_2\text{CoGa}$  ( $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ )), le moment magnétique est toujours différent d'un nombre entier, les valeurs obtenues ne satisfaisant pas à la règle de Slater-Pauling, ce qui confirme le caractère métallique pour ces composés. Sauf le cas de  $\text{Mn}_2\text{CoAl}$  ( $\text{Hg}_2\text{CuTi}$ ) qui satisfait la règle de Slater-Pauling en raison du comportement demi-métallique du composé dans cette structure.

**Références**

- [1] Z. ABOUB, « Etude ab-intio des propriétés structurales et électroniques des systèmes (Sr, La) (Ti, Ni) O<sub>3</sub> », Université Kasdi Merbah, Ouargla, Mémoire de Magister, (2012).
- [2] O. K. Andersen, Phys. Rev. B12, 3060 (1975).
- [3] K. Schwarz, P. Blaha, Lecture notes chemistry, 67, 139 (1996).
- [4] S. H. Wei, H. Krakauer, and M. Weinert, Phys. Rev. B32, 7792 (1985).
- [5] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave + local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Vienna, Austria), ISBN 3-9501031-1-2. (2001).
- [6] Singh. D. Planes waves, pseudo-potentials and the LAPW method. Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, (1994).
- [7] Perdew J. P, Burke S, Ernzerhof, M. Phys Rev Lett 77 (1996) 3865.
- [8] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390

## Conclusion générale

Ce modeste travail a été consacré pour étudier les propriétés physiques d'une classe d'alliages appelée les alliages d'Heusler  $Mn_2CoZ$  ( $Z = Al, Ga$ ), définie par la famille  $X_2YZ$ . L'objectif de ce mémoire est de prédire et comparé les propriétés structurales, électroniques, magnétiques de nos matériaux dans les deux structure  $Cu_2MnAl$  et  $Hg_2CuTi$ .

Dans le cadre de la fonctionnalité de la densité (DFT), les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées (LAPW), et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation de la densité du gradient généralisée (GGA).

Les résultats obtenus à l'étude des propriétés structurales de ces alliages ont montré que la structure  $Hg_2CuTi$  est plus stable dans les deux matériaux.

Les propriétés électroniques montrent que le composé  $Mn_2CoGa$  présentent un caractère métallique pour les deux structures. Par contre le composé  $Mn_2CoAl$  présente un comportement demi-métallique dans la structure  $Hg_2CuTi$  et un comportement métallique dans la structure  $Cu_2MnAl$ .

L'exploitation des résultats fournis par l'étude des propriétés magnétiques établit que l'origine du magnétisme dans nos alliages d'Heusler provient principalement du métal de transition Mn.

Au niveau des perspectives de notre étude, elles seront tributaires des méthodes de calcul choisies et dépendront aussi des orientations. À ce propos, il pourrait être intéressant de poursuivre des investigations sur les points suivants :

- Utiliser d'autres approximations comme la LDA, EVGGA, pour faire la comparaison entre certains de nos résultats.
- Etudier les propriétés élastiques et mécaniques de ces composés.