



CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT

Institut Des Sciences Et Technologies

Département Des Sciences De La Matière



MEMOIRE

DE MASTER

Présenté par :

- **BEKKI Razika**
- **LAKRI Amel**

Filière : PHYSIQUES

Spécialité : Nano-Physique

Intitulé :

***L'effet de la pression sur les propriétés physique de
Demi Heusler FeVSb***


Devant le jury composé de :

Président : Mr. DAHMANE Fathallah MCA. Centre universitaire de Tissemsilt

Encadreur : Mr. MOKHTARI MOHAMED MCA. Centre universitaire de Tissemsilt

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

Année universitaire : 2020-2021



« L'imagination est plus importante que le savoir. »

{Albert EINSTEIN}

Remerciement

Remerciement :

D'abord nous remercions notre dieu de nous avoir donné, la force et le courage, la santé, les moyens afin de pouvoir accomplir ce travail.

*Les premières personnes que nous tenons à remercier particulièrement notre encadreur monsieur **MOKHTARI Mohamed** à l'orientation, la confiance, la patience, qui ont constitué un apport considérable sans lesquels ce travail n'aurait pas pu être mené au bon port.*

Nos vifs remerciement vous également aux membres du jury qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions.


Nous tenons à exprimer nos sincères remerciements et respects à tous les professeurs qui nous ont enseigné et qui par leurs compétences nous ont soutenu dans la poursuite de nos études.

*Nous souhaitons également exprimer notre gratitude au **ABANE Mahdi et Fatima et Soumia** pour toutes tentatives de fournir des composants nécessaires de recherche.*

Enfin, on remercie tous ceux qui, de près ou loin, ont contribué à la réalisation de ce travail.

Dédicace

Dédicace :



C'est avec profonde gratitude et sincères mots, que nous dédions ce travail de fin d'étude à nos chers parents ; qui ont sacrifié leur vie pour nous réussite et nous ont éclairé le chemin par leurs conseils judicieux.

Nous espérons qu'un jour, nous pourrons leur rendre un peu de ce qu'ils ont fait pour nous, que dieu leur prête bonheur et longue vie.

Nous dédions aussi ce travail à nos frères (Mohamed Amine, Amine BELABESS, Mohamed, Ibrahim, Yacine, Youcef) et nos Sœurs (Asma, Rihab, Samia) nous espérons que ce travail soit un exemple pour Vous de persévérance, de courage et de générosité.

Nous tenons de dédier ce travail à toute nos famille ainsi nos amies.

RAZIKA ET AMEL



SOMMAIRE

Sommaire

Sommaire :

Liste des figures :.....	i
Liste des tableaux :.....	ii
Introduction générale :	1
Chapitre I : Les Alliages Heuslers	2
I. 1. Introduction :	2
I. 2. Généralités sur les Alliages Heuslers :	3
I.3. Nomenclature des alliages Heuslers :	4
I.3.1. Alliages demi-Heuslers (Half-Heuslers) :	4
I.3.2. Alliages Full-Heuslers :	4
I.4. Classification et structure cristalline des alliages d'Heuslers :	4
I.4.1. Structure cristalline des alliages demi-Heuslers (half-Heuslers) :	5
I.4.1.1. Structure de type C1b :.....	6
I.4.1.2. Structure de type C1 :	7
I.4.1.3. Structure de type L21 :	7
I.4.1.4. Structure de type B2 (CsCl) :	8
I.4.1.5. Structure de type NaTi (B32a) :.....	8
I.4.1.6. Structure de type A2 (W) :	8
I.4.2. Structure cristalline des alliages full-Heuslers :.....	9
I.4.2.1. Structure L21 (Cu ₂ MnAl) :.....	10
I.4.2.2. Structure Y-type (LiMgPbSb) :	11
I.4.2.3. Structure X (CuHg ₂ Ti) :	11
I.4.2.4. Structure DO ₃ (BiF ₃) :	12
I.4.2.5. Structure B2 (CsCl) :	12
I.4.2.6. Structure B3a ₂ (NaTi) :	12
I.4.2.7. Structure A2 (W) :	12
I.5. Comportement magnétique des alliages d'Heuslers :	12
I.6. Conclusion :.....	13
Bibliographie :	15
.....	2
Chapitre II : Résultats et Discussions	20
II. 1. Introduction :	20
II.2. Détails de calcul :	20

Sommaire

II.3. Propriétés structurales :	21
II.4. propriétés électroniques :	22
II.5. Propriétés magnétiques :	24
II.6. Effet de la pression :	24
II.7. Conclusion :	26
Bibliographie :	27
Conclusion générale :	28

Listes des figures

Liste des figures :

Figure. I. 1 : Principales combinaisons de formation d'alliages Heuslers.	3
Figure. I. 2 : Structure cristalline des alliages demi-Heuslers.	5
Figure. I. 3 : Composition de la structure cristalline C1bde l'alliage Heusler	6
Figure. I. 4 : Structure demi-Heusler: le désordre de type C1.	7
Figure. I. 5 : Structure demi-Heusler : le désordre de type L21.....	7
Figure. I. 6 : Structure demi-Heusler: le désordre de type B2.....	8
Figure. I. 7 : Structure demi-Heusler: le désordre de type NaTl.....	8
Figure. I. 8 : Structure demi-Heusler: le désordre de type A2.	8
Figure. I. 9 : les différents types de structures cristallines	10
Figure. I. 10 : Schémas représentatifs des mailles cubiques : Full-Heusler.	10
Figure. I. 11 : Structure de l'alliage Heusler quaternaire (LiMgPdSn).....	11
Figure. I. 12 :Structure de l'alliage Heusler inverse (CuHg2Ti).	12
Figure. I. 13 : (a) composé demi-Heusler de la formule XYZ (structure C1b) (b) composé full-Heusler de formule X2YZ (structure L21) [56]	13
Figure. II. 1 Énergie totale en fonction du volume pour FeVSb.....	22
Figure. II. 2 : Structure de bandes du composé FeVSb dans le type α pour des spins minoritaires et majoritaires.	23
Figure. II. 3 : Densités des états totales et partielles pour l'alliage semi Heusler FeVSb dans le type α	24
Figure. II. 4 : l'effet de la pression sur les propriétés magnétique de semi heusler FeVSb. 25	25

Liste des tableaux

Liste des tableaux :

Tableau. I. 1 : Occupation des sites, formule générale, type de structure (selon différentes bases de données) pour différents ordres atomiques et l'espace groupe des composés demi-Heuslers.....	6
Tableau. I. 2 : Les différents possibilités d'occupations des sites non-équivalents dans la structure demi-Heusler C1b.....	7
Tableau. I. 3 :Les différentes structures des composés full-Heuslers [45].....	9
Tableau. I. 4 : Les positions des atomes pour les trois configurations possibles pour les alliages Heusler QuaternairesXX'YZ.	11
Tableau. II. 1 : regroupe des différentes positions des atomes d'un alliage FeVSb.....	21
Tableau. II. 2 : Constante de réseau optimisée a (Å), module de compression B_0 (GPa), sa dérivée B_0' et l'énergie minimale E_0 et l'énergie de gap de l'alliage FeVSb.	22
Tableau. II. 3 : Moments magnétiques locaux μ (μ_B) des atomes en différents sites, moments magnétiques totaux μ_{total} (μ_B) et énergie de gap E_g (eV) pour FeVSb dans les types α	24

Introduction générale

Introduction générale

Introduction générale :

Les alliages Semi Heusler sont des composés ternaires aux propriétés électroniques et magnétiques extrêmement variées. Actuellement étudiés pour un large spectre d'applications, allant du thermoélectrique au solaire, ils nous intéresseront dans le cadre de ce mémoire du fait de leurs caractéristiques avantageuses pour l'électronique de spin.

Depuis la prédiction de la demi-métallicité de certains membres de cette famille dans les années 80, de nombreuses études théoriques et expérimentales ont contribué à prouver que ces alliages avaient toutes les caractéristiques attendues d'un matériau magnétique pour la spintronique.

L'intérêt des techniques de calcul ab initio pour la compréhension des résultats expérimentaux n'étant plus à démontrer, nous avons choisi d'effectuer des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité pour répondre aux diverses questions se posant autour des alliages Semi Heusler. L'ambition de ce mémoire est de contribuer au développement de dispositifs pour l'électronique de spin plus performant.

Ce mémoire est organisé comme suit :

- ✓ Dans le premier chapitre qui se déroule sur généralité sur les alliages de Heusler et demi Heusler et aussi nous décrivons les différentes structures possibles
- ✓ dans le deuxième chapitre, on cite les résultats des calculs et leurs discussions, ces calculs sont divisés en deux parties : la 1^{ère} partie : est l'étude des propriétés structurales et électroniques du demi heusler FeVSb, et dans la 2^{ème} partie : est étude de l'effet de la pression sur les propriétés magnétique de semi heusler FeVSb.

Chapitre I : Les Alliages Heuslers

Chapitre I : Les alliages Heuslers

Chapitre I : Les Alliages Heuslers

I. 1. Introduction :

La recherche de nouveaux matériaux dans le domaine de la spintronique conduit à la naissance d'une nouvelle classe de composés nommés les composés Heuslers ; il y a environ 30 ans, ils semblent être des matériaux de choix pour beaucoup d'applications en raison de leur structure électronique accordable, en plus, ils ont une multitude de différentes propriétés physiques. Cet atout rend la conception de souhaitable propriétés, allant des composés demi-métalliques ferromagnétiques [1, 2], des antiferromagnétiques complètement compensés [3] à semi-conducteurs non magnétiques [4, 5], et même supraconducteurs [6, 7]. Parmi lesquels, on peut citer quelques-uns : les ferromagnétiques (Cu_2MnAl [8]), les ferrimagnétiques (Mn_2VAl [9]), les semi-conducteurs (Fe_2VAl [10]), les systèmes de fermions lourds (Cu_2CeIn [11]), et les supraconducteurs (Ni_2ZrGa [12]).

Plus de 3000 composés Heuslers ont été découverts pour l'utilisation dans plusieurs domaines, entre autre le domaine de la spintronique, de l'optoélectronique et de la magnéto-optique. Au cours de ces dernières années, des nouveaux domaines d'applications émergent, comprenant des technologies environnementales comme la thermoélectrique [13, 14] et la technologie des cellules solaires [15], même la découverte récente des isolants topologiques qui présente un nouveau quantum d'état de la matière ; tous ces intéressantes propriétés ouvrent une grande porte aux technologies du futur avec des possibilités inimaginables pour l'utilisation des composés Heuslers [16, 17].

Dans ce premier chapitre, nous donnons un aperçu sur les alliages Heuslers depuis leur découverte aussi nous décrivons les différentes structures possibles, les principales propriétés et les domaines d'utilisation.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

I. 2. Généralités sur les Alliages Heuslers :

Le prototype des composés Heuslers est l'alliage Cu_2MnAl a été découvert par *Friedrich Heusler* en 1903[8], où sa structure cristalline a été déterminée par *Bradley* et *Rodgers* en 1934[18], il a le comportement ferromagnétique et une température de Curie élevée. En effet, leur particularité et leurs propriétés sont complètement différentes de ces éléments constitutifs. Prenons l'exemple de l'alliage Cu_2MnAl qui est un composé magnétique, bien que ni Cu, Mn et ni Al soient naturellement magnétiques par eux-mêmes [8, 19]. Un autre exemple celui de l'alliage TiNiSn [13, 20], qui a le comportement d'un semi-conducteur, même s'il est composé de trois métaux [21]. Autrement dit, les alliages Heuslers sont des composés ternaires de type ferromagnétique. C'est en 1963 a été montré que le Mn a une forte contribution dans le moment magnétique total de l'alliage Cu_2MnSb [22].

Il est intéressant de relever que le Mn pur présente un ordre de type antiferromagnétique. Les propriétés magnétiques des Heuslers sont fortement dépendantes de la structure cristalline car l'arrangement des atomes entre eux donne lieu au ferromagnétisme.

Ce précédent travail donne la naissance d'une nouvelle classe des matériaux les plus passionnants; où cette classe de matériaux est actuellement une grande collection avec plus de 3000 composés, connus sous le nom de composés ou alliages Heuslers sous la formule chimique générale de X_2YZ , où les atomes X et Y sont les éléments de transition, tandis que Z est un semi-conducteur ou un métal non magnétique. Le nombre infini de composés qui peut être préparé par la combinaison avec presque tous les éléments du tableau périodique est illustré dans la Figure I.1.

Composés Heusler X_2YZ

H																				He																														
Li	Be											B	C	N	O	F				Ne																														
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl				Ar																														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br				Kr																														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I				Xe																														
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At				Rn																														
Fr	Ra																																																	
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>La</td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Ac</td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </tbody> </table>																					La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																				
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																				

Figure. I. 1 : Principales combinaisons de formation d'alliages Heuslers.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

I.3. Nomenclature des alliages Heuslers :

I.3.1. Alliages demi-Heuslers (Half-Heuslers) :

Les alliages de cette famille ont une composition chimique de la forme XYZ; en 1983, **Groot** et ses collaborateurs[23] ont découvert un alliage demi-Heusler de type NiMnSb[24], les demi-Heuslers peuvent être compris comme des composés constitués de deux parties de caractère différent; une partie covalente et une autre partie ionique. En conséquent, les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique [25].

La nomenclature dans la littérature ne varie pas par l'ordre alphabétique des éléments ou d'une façon aléatoire mais elle varie par leur degré de l'électronégativité. L'élément le plus électropositif est placé au début de la formule, il peut être un élément d'un groupe principal, un métal de transition ou un élément des terres rares. L'élément le plus électronégatif se trouve à la fin est considéré comme un élément d'un groupe principal de la seconde moitié de la classification périodique, par exemple le cas des LiAlSi, ZrNiSn, et LuAuSn[26, 27].

I.3.2. Alliages Full-Heuslers :

Les alliages Heuslers ont souvent connu sous le nom de *full-Heuslers* qui sont une classe de composés intermétalliques. Les alliages full-Heuslers ont la formule générale X₂YZ, où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément des groupes III, IV ou V dans le tableau périodique de Mendeleïev ; ils se distinguent en des cas exceptionnels :

L'élément Y peut être un élément des terres rares, ou bien un métal alcalino-terreux, l'exemple de Co₂MnSi, et Fe₂VAl [28, 29] montre que le métal (X) existe en deux fois, placé au début de la formule (le plus électropositif), tandis que l'élément le plus électronégatif est placé à l'extrémité. Les exceptions sont les composés dans lequel un élément peut être définitivement défini pour devenir plus électropositif, par exemple les composés LiCu₂Sb et YPd₂Sb [30], où l'élément électropositif est mis au début en accord avec la nomenclature IUPAC (l'Union internationale de chimie pure et appliquée).

I.4. Classification et structure cristalline des alliages d'Heuslers :

Les alliages Heuslers sont classés en deux grandes familles : selon la structure cristalline et la structure atomique désordonnée. Cette nouvelle classification se fait en fonction de l'ordre des atomes au sein de la maille cristalline. Les propriétés des alliages Heuslers dépendent fortement de l'ordre atomique, les petites quantités de désordre au sein de la distribution des atomes sur

Chapitre I : Les alliages Heuslers

les sites du réseau provoquent des changements notables dans leur structure électronique, et même un changement sur les propriétés magnétiques et celles du transport [31,32]. Leurs atomes sont ordonnés en parfaite arrangement suivant les structures $C1_b$, $L2_1$ pour le cas des demi-Heuslers et Y-type pour le cas des full-Heuslers.

Pour la structure atomique désordonnée, il y a plusieurs types : A2, B2, DO_3 , et B32a, le détail de ces structures est donné dans les paragraphes qui suivent.

I.4.1. Structure cristalline des alliages demi-Heuslers (half-Heuslers) :

Les alliages de cette famille ont une composition chimique de la forme XYZ, les alliages demi-Heuslers sont des alliages ternaires intermétalliques impliquant deux types différents de métaux de transition X et Y, mais Z est un élément de valence *sp*. Ces alliages se cristallisent dans la structure cubique $C1_b$, en contrepartie, il a été découvert qu'il est possible de quitter l'un des quatre sous-réseaux inoccupés où un des réseaux de l'atome X est remplacé par le vide, ces sites vacants se trouvent sur les sites c2 de la structure $L2_1$.

Expérimentalement, cette caractéristique a été confirmée par l'absorption infrarouge [33] et par annihilation de positron résolue en spin [34, 35].

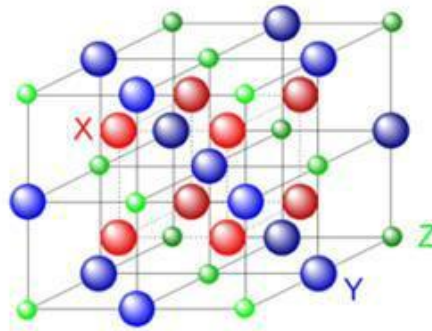


Figure. I. 2 : Structure cristalline des alliages demi-Heuslers.

Le Tableau I.1 résume les différents types de désordre atomique peuvent être observés pour la structure demi-Heusler $C1_b$ [36] ainsi que les différentes notations en fonction de la base de données pour les structures du cristal inorganique « Inorganic crystal structure database » (ICSD): les rapports de structure « Strukturberichte » (SB), la base de données Pearson, ainsi que le groupe d'espace sont présentés pour l'ensemble des structures pour ces alliages Heuslers.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

Tableau. I. 1 : Occupation des sites, formule générale, type de structure (selon différentes bases de données) pour différents ordres atomiques et l'espace groupe des composés demi-Heuslers

Occupation des Sites	Formule générale	Type de structure			Groupe d'espace
		ICSD	SB	Pearson	
4a, 4b, 4c	XYZ	LiAlSi	C1 _b	cF16	F-43m (N°. 216)
4a= 4b, 4c	XZ ₂	CaF ₂	C1	cF12	Fm-3m (N°. 225)
4a, 4b, 4c=4d	X ₂ YZ	Cu ₂ MnAl	L2 ₁	cF16	Fm-3m (N°. 225)
4a= 4b, 4c=4d	XZ	CsCl	B2	cP2	Pm-3m (N°. 221)
4a= 4c, 4b=4d	YZ	NaTl	B32a	cF16	Fd-3m (N°. 227)
4a= 4b= 4c=4d	X	W	A2	cI2	Im-3m (N°. 229)

I.4.1.1. Structure de type C1_b :

La structure C1_b se compose en trois sous-réseaux remplis et d'un sous-réseau interpénétré vacant de la structure cubique à face centrées (cfc). La troisième structure de cfc est décalée d'un quart de la cellule unitaire par rapport à la diagonale de la structure rock-Salt [37].

En général, la structure des demi-Heuslers peut être considérée comme un sous-réseau ZnS (de positions de Wyckoff placées aux sites 4a et 4c) dans lequel les sites octaédriques (4b) sont occupés.

Cette description met l'accent sur l'interaction de liaison covalente entre deux éléments contenus et qu'elle joue un rôle majeur dans les propriétés électroniques du matériau. En revanche, il est intéressant de mentionner que les atomes sur les sites 4a et 4b construisent un sous-réseau de type NaCl, à savoir leur interaction a un fort caractère ionique [38]. La relation entre ces différents réseaux cristallins est illustrée dans la Figure I.3.

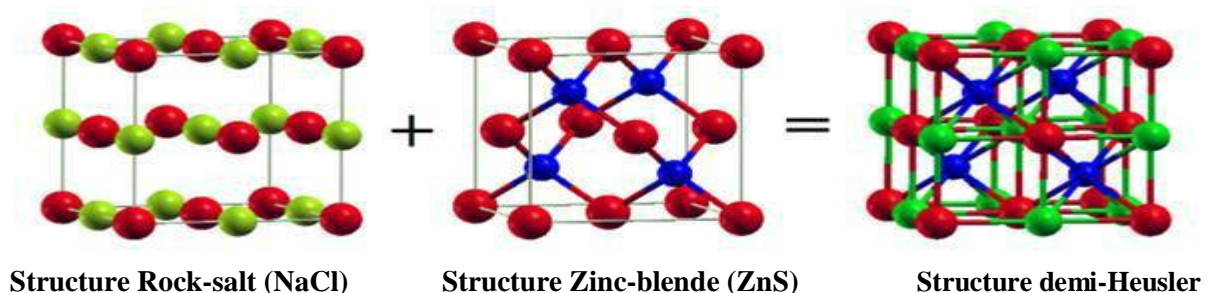


Figure. I. 3 : Composition de la structure cristalline C1_b de l'alliage Heusler

Ce type de structure a été découvert après 50 ans de la découverte de l'alliage Full-Heusler (Cu₂MnAl) [8]. Il peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes X, Y et Z [39], selon les positions de Wyckoff suivantes : 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4). On peut associer trois

Chapitre I : Les alliages Heuslers

arrangements atomiques non-équivalents à ce type de structure (C1b), le Tableau I.2 présente ces différentes possibilités.

Tableau. I. 2 : Les différents possibilités d'occupations des sites non-équivalents dans la structure demi-Heusler C1b.

	4a (0,0,0)	4c (1/4,1/4,1/4)	4b (1/2,1/2,1/2)
1 ^{er} arrangement	X	Z	Y
2 ^{ème} arrangement	Z	Y	X
3 ^{ème} arrangement	Y	X	Z

En règle générale, l'ordre atomique selon deux types I et II (voir le Tableau I.2) est fréquemment observé. Un prototype MgAgAs décrit généralement la structure C1b, où les éléments Y et Z forment un sous réseau covalent de type ZnS, tandis que X et Y construisent une maille de type NaCl (Mg et Ag) [40]. En réalité, ce prototype ne s'accorde pas la majorité des alliages demi-Heuslers [41]. Donc la plupart des composés demi-Heuslers suivent l'arrangement atomique du composé MgCuSb[40, 42], où les éléments Y et Z forment un sous réseau covalent de type ZnS, alors que les éléments X (électropositif) et Y (électronégatif) forme une maille de type NaCl. Dans l'exemple de MgCuSb, l'atome Cu est entouré par quatre atomes Mg et quatre atomes Sb sous la forme d'un cube idéal.

I.4.1.2. Structure de type C1 :

Dans le cas où les atomes X et Z prennent les positions 4a et 4b aléatoirement, on obtiendra alors une structure de type C1 sous le groupe d'espace $Fm\bar{3}m$ (N° 225).

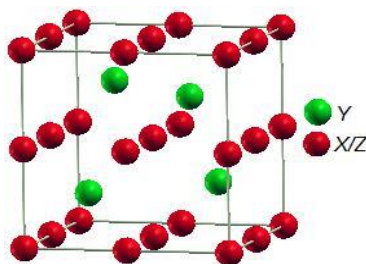


Figure. I. 4 : Structure demi-Heusler: le désordre de type C1.

I.4.1.3. Structure de type L2₁ :

Un mélange entre les positions 4c et 4d vacants conduit à une structure de type Cu₂MnAl et toujours dans le même groupe d'espace $Fm\bar{3}m$ (N° 225).

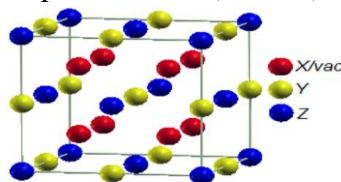


Figure. I. 5 : Structure demi-Heusler : le désordre de type L21.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

I.4.1.4. Structure de type B2 (CsCl) :

Lorsque les atomes sur les positions 4a et 4b remplacent leurs sites (désordre Y-Z) et occupent finalement leurs sites de façon absolument aléatoire, l'alliage se transforme en structure B2 avec un groupe d'espace $Pm-3m$ (N° 221).

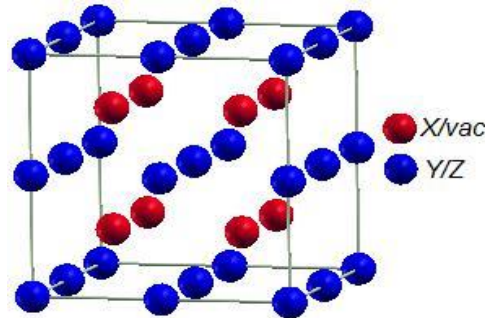


Figure. I. 6 : Structure demi-Heusler : le désordre de type B2.

I.4.1.5. Structure de type NaTl (B32a) :

Ce type est favorable dans le cas d'un désordre entre les positions 4a et 4c d'une part, et 4b et 4d d'autre part. Son groupe d'espace est $Fd-3m$ (N° 227).

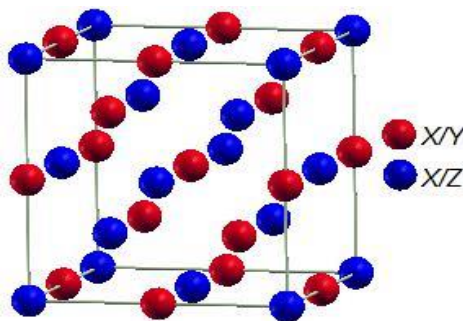


Figure. I. 7 : Structure demi-Heusler : le désordre de type NaTl.

I.4.1.6. Structure de type A2 (W) :

Lorsque tous les atomes occupent les positions de Wyckoff (4a, 4b, 4c et 4d) d'une façon totalement aléatoire donc un désordre de type tungstène est observé sous un groupe d'espace $Im-3m$ (N° 229).

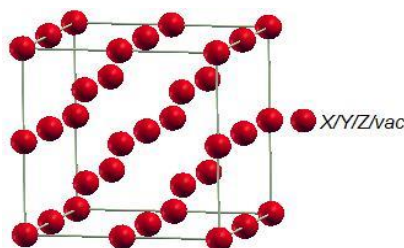


Figure. I. 8 : Structure demi-Heusler : le désordre de type A2.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

I.4.2. Structure cristalline des alliages full-Heuslers :

Les alliages full-Heuslers sont connus sous la structure $L2_1$ est la plus connue découverte par *Heusler*, où tous les atomes sont bien arrangés mais il y a d'autres structures qui sont des résultats de désordre au sein de la distribution des atomes sur les sites du réseau.

Ce désordre dans la structure peut modifier la structure électronique de manière distincte ; aussi il a une influence sur les propriétés magnétiques et celles du transport [31,32].

Plusieurs types de structures désordonnées ont été observés dans les alliages full-Heuslers, tel que la structure $L2_1$, Y, A2, DO_3 , et B2 [43].

Les différentes structures possibles sont conformément à la base de données de la structure des cristaux inorganiques (ICSD), à la base de données Strukturberichte (SB) et à celle de Pearson [43, 44, 45] pour les alliages full-Heuslers sont résumées dans le Tableau I.3.

Tableau. I. 3 :Les différentes structures des composés full-Heuslers [45].

Occupation des Sites	Formule générale	Type de structure			Groupe d'espace
		ICSD	SB	Pearson	
X, X', Y, Z	XX'YZ	LiMgPdSn	Y	cF16	F-43m (N°. 216)
X=X', Y, Z	X ₂ YZ	Cu ₂ MnAl	$L2_1$	cF16	Fm-3m (N°. 225)
X, X'=Y, Z	XX' ₂ Z	CuHg ₂ Ti	X	cF16	F-43m (N°. 216)
X=X'=Y, Z	X ₃ Z	BiF ₃	DO_3	cF16	Fm-3m (N°. 225)
X=X', Y=Z	X ₂ Y ₂	CsCl	B2	cP2	Pm-3m (N°. 221)
X=Y, X'=Z	X ₂ X' ₂	NaTl	B32a	cF16	Fd-3m (N°. 227)
X=X'=Y=Z	X ₄	W	A2	cI2	Im-3m (N°. 229)

Les structures cristallines correspondantes aux différents types de structures sont présentées dans la Figure I.9 [46], où ces structures sont décrites en détail dans les paragraphes suivants :

Chapitre I : Les alliages Heuslers

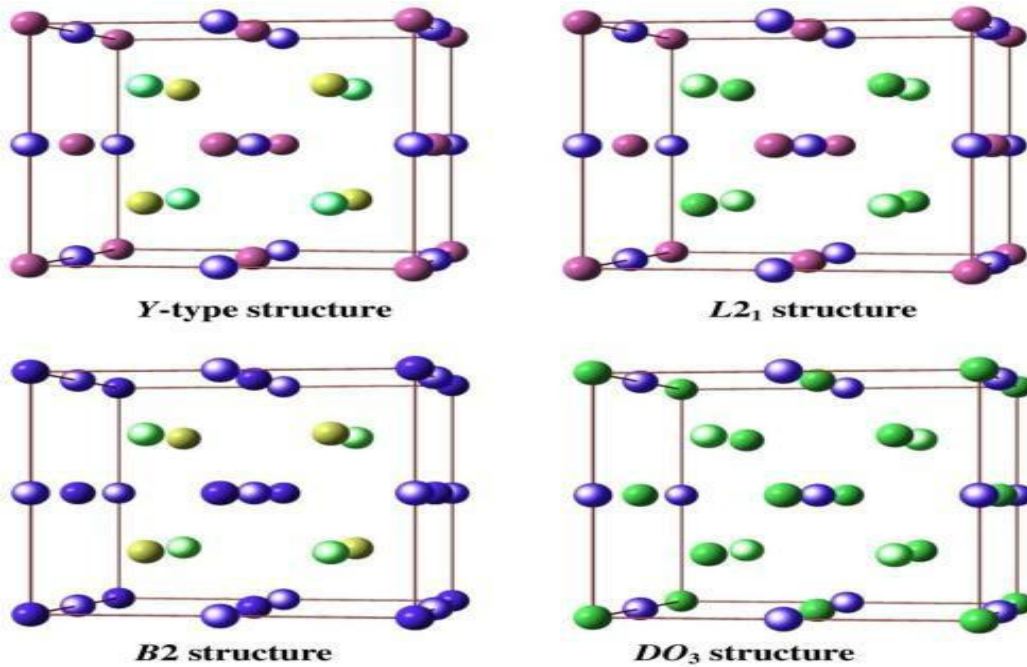


Figure. I. 9 : les différents types de structures cristallines

Les cercles bleus, violets, jaunes et verts représentent les positions 4a (0, 0,0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), 4c (1/4, 1/4, 1/4) et 4d (3/4, 3/4, 3/4), respectivement. Considérant maintenant X (4c (1/4, 1/4, 1/4)), X' (4d (3/4, 3/4, 3/4)), Y (4b (1/2, 1/2, 1/2)), et Z (4a (0, 0, 0)) pour l'édifice d'un alliage Heusler quaternaire avec la structure de type Y.

I.4.2.1. Structure L21 (Cu₂MnAl) :

Cette structure est formée par quatre mailles cubiques à faces centrées (cfc) : deux mailles sont occupées par l'atome X, une maille réservée pour l'atome Y et une dernière pour l'atome Z, cette structure est désignée par le groupe d'espace Fm-3m (N° 225). La Figure I.10 montre l'arrangement parfait des atomes dans cette structure :

X: (1/4,1/4,1/4), (3/4,3/4,3/4)

Y: (1/2,1/2,1/2)

Z: (0, 0,0)

AA:

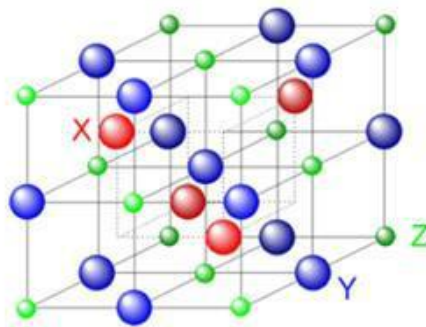


Figure. I. 10 : Schémas représentatifs des mailles cubiques : Full-Heusler.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

I.4.2.2. Structure Y-type (LiMgPbSb) :

Une nouvelle série d'alliages Heuslers quaternaires qui sont composés de 4 atomes différents avec une stœchiométrie de type 1:1:1:1, ces derniers peuvent être obtenue en remplaçant l'un des atomes X dans la formule X_2YZ par un autre atome X' .

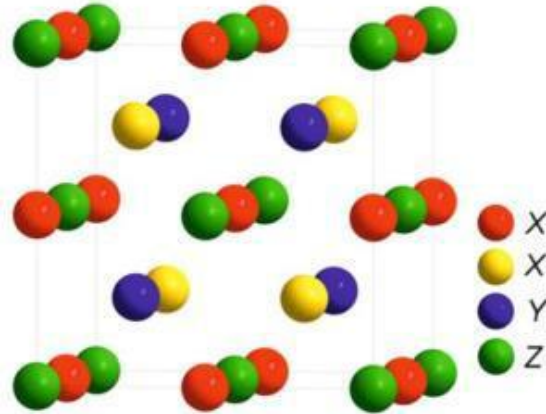


Figure. I. 11 : Structure de l'alliage Heusler quaternaire (LiMgPdSn).

Ces alliages ont la structure dite de type LiMgPbSb[47] avec le groupe d'espace F-43m

[48] (N° 216) sous la formule chimique $XX'YZ$, où X, X', et Y sont des métaux de transition et Z est un élément *sp*. La valence des atomes X' est inférieure à la valence des atomes X, et la valence de Y est strictement inférieure à celle des deux (X et X').

Trois variantes [49, 50, 51, 52] de la structure LiMgPdSn sont possibles : à savoir le type Y-(I), le type Y-(II) et le type Y-(III). On montre dans le Tableau I.4 les différentes positions atomiques des alliages Heuslers quaternaires.

Tableau. I. 4 : Les positions des atomes pour les trois configurations possibles pour les alliages Heusler Quaternaires $XX'YZ$.

	4a(0,0,0)	4c(1/4,1/4,1/4)	4b(1/2,1/2,1/2)	4d(3/4,3/4,3/4)
Y-type(I)	Z	X'	Y	X
Y-type(II)	Z	Y	X'	X
Y-type(III)	X'	Z	Y	X

I.4.2.3. Structure X (CuHg₂Ti) :

Cette structure est connue sous le nom des alliages Heuslers inverses, car l'un des sites X ou Y change sa position, ce type de structure est moins fréquemment observés [53]. Elle est présentée sous le groupe d'espace F-43m (N° 216).

Chapitre I : Les alliages Heuslers

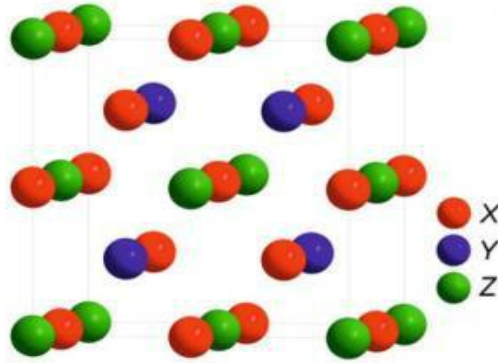


Figure. I. 12 : Structure de l'alliage Heusler inverse (CuHg₂Ti).

I.4.2.4. Structure DO₃ (BiF₃) :

La distribution aléatoire de X et Y ou X et Z conduit à un désordre de type DO₃ [25] sous le groupe d'espace Fm-3m (N° 225).

I.4.2.5. Structure B2 (CsCl) :

Le type B2 est une autre structure fréquemment observée, dans laquelle les sites Y et Z deviennent équivalents, c'est-à-dire le désordre se situe uniquement entre les sites Y et Z, ce qui conduit à une structure de type CsCl caractérisée par le groupe d'espace Pm-3m (N° 221).

I.4.2.6. Structure B3a2 (NaTi) :

Ce type de désordre est également connu comme le désordre NaTi. Dans cette catégorie de structure, les atomes X sont placés dans la position de Wyckoff 8a (0, 0, 0), tandis que les atomes Y et Z sont répartis d'une façon aléatoire dans la position 8b (1/2, 1/2, 1/2), ou la structure est apparue dans le groupe d'espace Fd-3m (N° 227).

I.4.2.7. Structure A2 (W) :

Dans cette structure, le désordre est complet où X, Y et Z sont distribués d'une façon totalement aléatoire, donc on obtient la structure A2 à symétrie réduite et un réseau bcc, elle est prise sous le groupe d'espace Im-3m (N° 229).

I.5. Comportement magnétique des alliages d'Heuslers :

Les alliages Heuslers sont attirés par la communauté scientifique depuis leur découverte en 1903, lorsque Monsieur *F. Heusler* trouve le composé Cu₂MnAl comme un matériau ferromagnétique malgré ses éléments constitutifs n'ont pas de l'ordre ferromagnétique [19, 8]. En revanche, la recherche pour ce type de composés a connu une rupture pendant les décennies

Chapitre I : Les alliages Heuslers

suivantes jusqu'à les années 1970, une minorité des rapports sur la synthèse de nouveaux composés Heuslers ont été publiés [20, 54].

Les alliages Heuslers retrouvent un intérêt scientifique après la découverte du composé MnNiSb par de *Groot et al.*[55] et dans Co₂MnSn par *Kubler et al.*[1] en 1983, où ils ont montré au sein de ces matériaux la propriété demi-métallique ferromagnétique.

Les matériaux demi-Heuslers (XYZ) présentent un sous-réseau magnétique puisque seuls les atomes sur les sites octaédriques peuvent porter un moment magnétique atomique.

Dans les composés full-Heuslers (X₂YZ), la situation est complètement différente à cause de l'existence des deux atomes X qui occupent les sites tétraédriques et qui permettent une interaction magnétique entre ces deux derniers, ainsi la formation d'un second sous-réseau magnétique plus délocalisé (Figure (I.10)). En raison de ces deux sous-réseaux magnétiques différents, les composés Heuslers de type X₂YZ montrent toutes sortes de phénomènes et ordres magnétiques, où plusieurs types de magnétisme sont connus, tel que : le ferrimagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et ferromagnétisme demi-métallique.

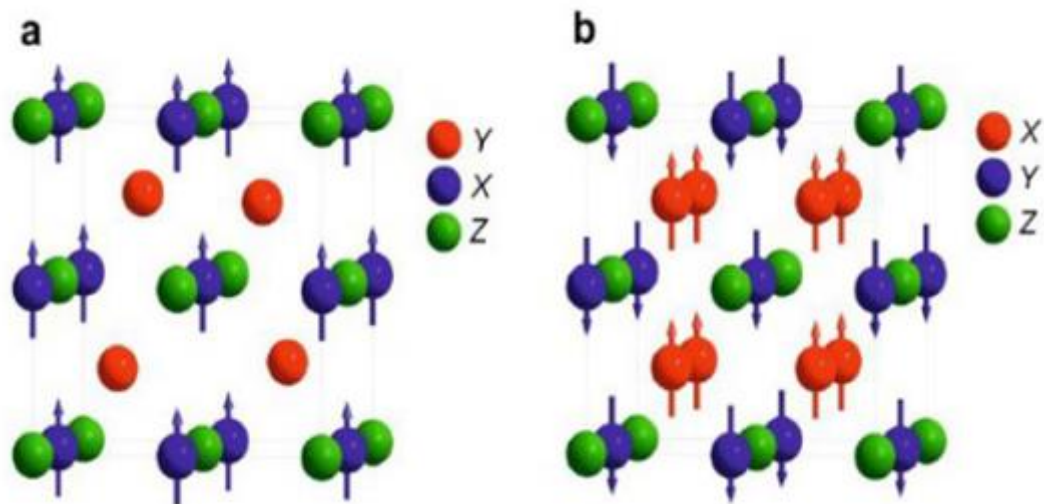


Figure. I. 13 : (a) composé demi-Heusler de la formule XYZ (structure C1b) (b) composé full-Heusler de formule X₂YZ (structure L21) [56]

I.6.Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons montré le contexte dans lequel cette thèse est t'inscrite, notamment, nous avons défini les alliages Heuslers avec l'ensemble d'études de leurs différentes propriétés, où ils présentent un domaine très étendu et qui reste toujours en évolution grâce à leurs nombreux avantages et à leurs contributions qui peuvent être utilisés dans des technologies nouvelles et leurs applications dans plusieurs secteurs : comme le secteur médical, militaire, spatial, industriel, etc.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

L'étude des alliages Heuslers est une idée très récente par rapport au nombre des prédictions théoriques et les analyses expérimentales qui existent dans la littérature, elle est amorcée après plus de cent ans la découverte de ces alliages.

Pour ce fait, nous sommes intéressés à étudier théoriquement les alliages Heuslers quaternaires à base de cobalt, ils peuvent être des demi-métaux ferromagnétiques, qui ont la particularité d'obéir à la règle de Slater et Pauling où ils peuvent avoir une polarisation en spin maximale (de 100 %) et une température de Curie relativement élevée; ces intéressantes propriétés montrent l'intérêt des alliages Heuslers quaternaires dans les domaines de la spintronique (l'électronique de spin) et de l'optoélectronique qui sont toujours un sujet d'actualité et d'innovation.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

Bibliographie :

- [1] J.Kübler, A.R. Williams and C.B. Sommers, *Phys. Rev*, B28, pp.1745–1755(1983).
- [2] C.Felser, G.H.Fecher and B.Balke, *Angew Chem, Int Ed* 46, pp.668–699(2007).
- [3] S.Wurmehl, H.C.Kandpal, G.H.Fecher and C.Felser, *J.Phys. Condens. Matter*, 18 pp.6171–6181 (2006).
- [4] D.Jung, H.J.Koo and M.H. Whangbo, *J.Mol.Struct: Theochem*, 527, pp.113–119(2000).
- [5] J.Pierre, R.V.Skolozdra, J.Tobola, S.Kaprzyk, C.Hordequin, M.A.Kouacou, I .Karla, R.Currat, E.Lelievre-Berna, *J.Alloys. Compd*, 262–263, pp.101–107(1997).
- [6] J.H.Wernick, G.W.Hull, T.H.Geballe, J.E.Bernadini and J.V.Waszcak, *Mater Lett*, 2, pp. 90–92(1983).
- [7] J.Winterlik, G.H.Fecher, A.Thomas and C.Felser, *Phys.Rev*, B79, pp.064508(1-9)(2009).
- [8] F.Heusler, *Verh DPG* 5, pp. 219 (1903).
- [9] H.Itoh, T.Nakamichi, Y.Yamaguchi and N.Kazama, *Trans.Japan.Inst.Met*, 24, pp.265–271(1983).
- [10] Y.Nishino, M.Kato, S.Asano, K.Soda, M.Hayasaka, and U.Mizutani, *Phys.Rev.Lett*, 79, pp. 1909–1912(1997).
- [11] H. Nakamura, Y.Kitaoka, K.Asayama, Y.Onuki, and T.Komatsubara, *J.Magn.Magn. Mater*, 76, pp. 466–467(1988).
- [12] J.Winterlik, G.H.Fecher, C.Felser, M.Jourdan, K.Grube, F.Hardy, H.von Lohneysen, K.L.Holman and R.J.Cava, *Phys.Rev*, B78, pp. 184506(1-9)(2008).
- [13] S.Sakurada and N.Shutoh, *Appl.Phys.Lett*, 86, pp. 082105(1-3)(2005).
- [14] C.Uher, J.Yang, S.Hu, D.T.Morelli and G.P.Meisner, *Phys Rev*, B59, pp.8615–8621(1999).
- [15] D.Kieven, R.Klenk, S.Naghavi, C.Felser and T.Gruhn, *Phys.Rev*, B81, pp.075208(1–6)(2010).
- [16] S.Chadov, X.Qi, J.Kübler, G.H.Fecher, C.S.Felser and S.C.Zhang, *Nat.Mat*, 9, pp.541–545 (2010).
- [17] H.Lin, A.Wray, Y.Xia, S.Xu, S.Jia, R.J.Cava, A.Bansil and M.Z.Hasan, *Nat.Mater*, 9, pp. 546–549(2010).

Chapitre I : Les alliages Heuslers

- [18] A.J.BradleyandJ.W.Rodgers,Proc. R.Soc,57,pp. 115–133(1934).
- [19] F.Heusler,W.Starck, E.HauptandVerh,DPG 5,pp. 220–223(1903).
- [20] P.J.Webster,J.Phys.Chem.Solids, 32,pp. 1221–1231(1971).
- [21] U.Hartmann,"MagneticMultilayersandGiantMagnetoresistance",ed.Dr.UweHartman n(Berlin:Springer).pp. 1–323(2000).
- [22] K.Endo,T.Ohoyama and R.Kimura, J.Physical.Society.Japan,19, pp.1494–1495(1964).
- [23] R.A.deGroot,F.M.Mueller,P.G.vanEngenandK.H.J.Buschow.Phys.Rev.Lett,50,pp. 2024–2027(1983).
- [24] K.Watanabe,Trans.Jpn.Inst.Met,17, pp.220–226(1976).
- [25] H.ZENASNI,"Etudethéoriqueundespropriétés magnétiques,électroniquesetstructuralesd es alliagesHeusler",UniversitédeTlemcen,Thèsededoctorat(2013).
- [26] H.U.Schuster,H.W.Hinterkeuser,W.SchäferandG.Will,Z.Naturforsch,B31,pp.1540–1541 (1976).
- [27] P.J.Sebastian,H.Eckert,S.Rayaprol,R.D.HoffmannandR.Pöttgen,Solid.State.Sci8,pp. 560–566(2006).
- [28] P.Gronberg,R.Schreiber,Y.Pang,M.D.BrodskyandH.Sowers,Phys.Rev.Lett,57,pp. 2442–2445(1986).
- [29] S.S.P.Parkin,N.MoreandK.P.Roche, Phys.Rev.Lett,64, pp.2304–2308(2004).
- [30] N.F.Mott,Proc. Phys. Soc,47,pp. 571–588(1935).
- [31] Y.Miura,K.Nagao andM.Shirai,Phys.Rev, B69,pp. 144413(1–7)(2004).
- [32] S.Picozzi,A.ContinenzaaandA.J.Freeman,Phys.Rev,B69,pp.094423(1–7)(2004).
- [33] M.M.Kirillova, A.A.Makhnev, E.I.Shreder, V.P.Dyakina, and N.B.Gorina, Phys. Status.Solidi,B187,pp.231–240 (1995).
- [34] K.E.H.M.HanssenandP.E.Mijnarends,Phys.Rev,B34,pp.094423(5009–5016)(1986).
- [35] K.E.H.M.Hanssen,P.E.Mijnarends,L.P.L.M.RabouandK.H.J.Bushow,Phys.Rev,B42,pp. 1533–1540(1990).

Chapitre I : Les alliages Heuslers

- [36] G.E.Bacon,J.S.Plant,J.Phys.F:MetPhys,1,pp.524–532 (1971).
- [37] S.J.Poon,"inRecent Trends in Thermoelectric Materials Research I",ed. T.M.Tritt Semiconductors and Semimetals 70, Chap.2(Academic,New York),pp.37–76(2001).
- [38] F.Casper,T.Graf,S.Chadov,B.Balke,and C.Felser,Semicond.Sci.Technol, 063001(1–8)(2012).
27,pp.
- [39] P.J.Webster and K.R.A. Ziebeck,"Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements", Part 2, 19C. Ed. H.R.J. Wijn (Berlin: Springer) Berlin: Springer, pp. 75–184(1988).
- [40] H.Nowotny and W. Sibert, J.Z. Metallkunde, 33, pp.391–394(1941).
- [41] P.Villars and L.D.Calvert,"Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases", American Society of Metals, vol 1-3, pp.1–3258 (1991)..
- [42] J.Nuss and M.Jansen, Z.Anorg.Allg.Chem, 628, pp.1152–1157(2002).
- [43] T.Graf, C.Felser and S.S.P.Parkin, Prog.Solid.State .Chem, 39, pp.1–50(2011).
- [44] S.Picozzi, A.Continenza and A.J.Freeman, Phys.Rev, B66, pp.094421(1–7)(2004).
- [45] T.Graf, F.Casper, J.Winterlik, B.Balke, G.H.Fecher, C.Felser, Z.Anorg.Allg.Chem 635, pp. 976–981 (2009).
- [46] L.Bainsla and K.G. Suresh, J. Appl. Phys, 3, pp.031101 (1–21)(2016).
- [47] J.Drews, U. Eberz and H.Schuster, J. Less-Common Met, 116, pp. 271–278 (1986).
- [48] X.Dai, G.Liu, G.H.Fecher, C.Felser, Y.Li and H.Liu, J. Appl. Phys, 105, pp. 07E901 (1–3) (2009).
- [49] L.Xiong, L.Yi and G.Y.Gao, J. Magn.Magn. Mater, 360, pp.98–103(2014).
- [50] M.Halder, M.D. Mukadam, K.G.Suresh and S.M.Yusuf, J.Magn.Magn. Mater, 377, pp. 220–225(2015).
- [51] Q.Gao, L.Li, G.Lei, J.Deng and X.Hu, J.Magn.Magn.Mater, 379, pp.288–293 (2015).
- [52] M.Singh, H.S.Saini, J.Thakur, A.H.Reshak and M.K.Kashyap, J.Alloys Compd, 580, pp.

Chapitre I : Les alliages Heuslers

- 201–204(2013).
- [53] M.Puselj and Z.Ban, *CroatChemActa* ,41, pp. 79–83(1969).
- [54] S.Brooks andJ.MWilliams, *Phys. StatSol*, A32,pp.413–417(1975).
- [55] C.M.Fang, G.A. Wjis andR.A. Groot, *J.Appl. Phys*, 91, pp. 8340–8344(2002).
- [56] M.Hehn,F.MontaigneandA.Schuhl, "Magnéto-résistancegéanteetélectroniquedespin", *Techniquesdel'Ingénieurl'expertisettechniqueetscientifique*deréférence,10-Nov-2002.
- [57] B.Balke,S.Wurmehl,G.H.Fecher,C.FelserandJ.Kübler, *Sci.Technol.Adv.Mater*,9,pp.014102(1–13) (2008).
- [58] P.J.Webster and K.RA.Ziebeck, in *Alloysand Compoundsofd-Elementswith Main GroupElements,Part2*,ed.H.P.J.Wijn(Springer-Verlag,Heidelberg),Landolt-Börnstein,New Series,Group III, Vol.19C,pp. 104–185(1988).
- [59] K.R.A.ZiebeckandK.U.Neumann, "inAlloysandCompoundsofd-ElementswithMain GroupElements",ed.H.P.J.Wijn(Springer-Verlag, Heidelberg), Landolt-Börnstein,NewSeries,Group III, Vol.32, pp. 64–314(2001).
- [60] K.H.J.BuschowandP.G.vanEngen, *J. Magn.Magn.Mater*,25,pp.90–96(1981).
- [61] R.Y.Umetsu,K.Kobayashi,A.Fujita,K.Oikawa,R.Kainuma,K.Ishida,N.Endo,K.Fukamichi, and A.Sakuma, *Phys. Rev*, B72,pp. 214412 (1–7) (2005).
- [62] S.Wurmehl,G.H.Fecher,H.C.Kandpal,V.Ksenofontov,C.Felser,H.-J.Lin, andJ.Morais, *Phys. Rev*, B 72, pp. 184434(1–9) (2005).
- [63] S.Wurmehl,G.H.Fecher,V.Ksenofontov,F.Casper,U.Stumm,C.Felser,H.-J.Lin, and Y.Hwu, *J.Appl. Phys*,99,pp. 08J103(1–3)(2006).
- [64] J.M.D.CoeyandM.Venkatesan, *J.Appl.Phys*,91, pp.8346–8350(2002).
- [65] J.Slater, *Phys.Rev*, 49,pp.537–545(1936).
- [66] C.FeslerandG.H.Fecher, "SpintronicsfromMaterialstoDevices",ed.Springer,pp.1–369 (2013).
- [67] J.Kübler, *J.Phys.Condens.Matter*, 18,pp. 9795–9807(2006).
- [68] J.Kübler,G.H.FecherandC.Felser, *Phys.Rev*,B76,pp.024414(1–7)(2007).

Chapitre I : Les alliages Heuslers

- [69] S.Wurmehl,G.H.Fecher,H.C.Kandpal,V.Ksenofontov,C.Felser,H.J.LinandMorais,Phys.Rev,B72, pp. 184434(1–9)(2005).
- [70] I.Galanakis,P.DederichsandN.Papanikolaou,Phys.Rev,B66,pp.132102(1–4)(2002).
- [71] L.Pauling, Phys.Rev, 54, pp. 899–904(1938).

Chapitre II : Résultats et Discussion

Résultats et discussions

Chapitre II : Résultats et Discussions

II. 1 .Introduction :

Un groupe motivant d'alliages ternaires de formule chimique XYZ appelés demi-Heusler (HH), cristallise dans la structure cubique à faces centrées (groupe d'espace $F43m$; n ° 216) [1, 2], où X est un métal de transition ou terre rare, Y est un métal de transition et Z est l'élément principal du groupe [3]. Ces matériaux ont un grand intérêt pour les chercheurs expérimentaux et théoriques depuis qu'ils ont été étudiés pour la première fois par Andreas Heusler [4]. La spintronique est un domaine prometteur de l'électronique à l'échelle nanométrique qui utilise le spin des électrons, plutôt qu'une charge électrique, pour coder et traiter les données [5]. Les ferromagnétiques semi-métalliques (HMF) sont caractérisés par une structure de bande semi-conductrice pour une direction de spin avec un gap d'énergie clair, tandis que la structure de bande de l'autre direction de spin est métallique [6, 7]. La densité électronique d'états (DOS) à E_F d'un demi-métal idéal est composée d'une seule direction de spin, ce qui se traduit par un rapport de polarisation de spin très élevé au niveau de Fermi. Principalement, ces composés (demi-métaux) sont efficaces à utiliser dans la conduction du courant polarisé en spin en raison de sa grande sensibilité au champ magnétique appliqué. Ces types de matériaux ont de nombreuses applications technologiques, telles que la spintronique [8, 9] et l'injection de spin dans les semi-conducteurs [10, 11].

De nombreux articles de recherche se concentrent sur les études et l'analyse des propriétés physiques des composés demi-Heusler à une pression ambiante; par exemple, les propriétés structurales et optoélectroniques du demi-Heusler FeVSb sont étudiées dans [12]. Les caractéristiques électroniques et magnétiques des différents alliages demi Heusler sont calculées dans [2] tandis que les propriétés thermodynamique et élastiques du NiVSb sont étudiées par Gu et al. [13].

Dans ce mémoire, nous rapportons les propriétés électroniques et magnétiques du FeVSb. Par conséquent, notre objectif principal est d'effectuer une étude de la stabilité structurale, des propriétés électroniques et magnétiques de FeVSb en utilisant l'approximation de gradient généralisées (GGA) dans le schéma de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE).

II.2. Détails de calcul :

Dans ce travail, les calculs sont réalisés en utilisant la méthode de l'onde plane augmentée linéarisée à plein potentiel (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) [17] implémenté dans le code WIEN2k [18]. La convergence de l'ensemble de base était

Résultats et discussions

contrôlée par un cut-off $K_{max} = 7 / RMT$, où K_{max} est le plus grand vecteur de réseau réciproque utilisé dans l'onde plane et RMT est le plus petit de tous les rayons de sphère atomique. L'amplitude du plus grand vecteur dans l'expansion de Fourier de densité de charge (G_{max}) était de 12 (a.u.)⁻¹, et nous sélectionnons la convergence de charge comme 0,0001e pendant les cycles d'auto-cohérence. L'énergie de coupure a été prise -6,0 Ry. Cette énergie définit la séparation des états de valence et de noyau. Ces paramètres confirment de bonnes convergences pour l'énergie totale.

Les rayons de muffin-étain (MT) sont de 2,18 ua. Pour V et 2,24 a.u pour Sb et Fe.

La structure de bande et la densité d'état (DOS) sont calculées par les approximations GGA.

II.3. Propriétés structurales :

Les alliages dits semi Heusler ont une composition stœchiométrique de type XYZ, où X et Y sont des métaux de transition et Z représente les éléments non magnétiques du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Ils cristallisent, dans des structures cubiques du réseau de Bravais cubique à faces centrées, (cfc). L'étude de l'état d'équilibre est l'analyse de la variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille, nous avons examinés trois configurations possibles [11, 12, 13] de la structure FeVSb : à savoir le type α -(I), le type β -(II) et le type Ω -(III).

Tableau. II. 1 : regroupe des différentes positions des atomes d'un alliage FeVSb.

	Fe	V	Sb
-type α (I)	(0.0.0)	(1/4.1/4.1/4)	(3/4.3/4.3/4)
-type β (II)	(1/4.1/4.1/4)	(0.0.0)	(3/4.3/4.3/4)
-type Ω (III)	(0.0.0)	(1/2.1/2.1/2)	(3/4.3/4.3/4)

Pour déterminer le paramètre de maille d'équilibre et trouver comment l'énergie totale varie en fonction de ce paramètre, nous avons effectué des optimisations structurales pour l'état ferromagnétique (FM).

L'optimisation structurale s'effectue en minimisant l'énergie totale en fonction du volume V pour les trois types d'arrangement : α , β et γ d'alliages semi Heusler FeVSb, l'équation utilisée est l'équation de Murnaghan donnée par :

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \dots \dots \dots (II.1)$$

Résultats et discussions

Où B_0 et B'_0 sont respectivement le module de compression à l'équilibre et sa dérivée par rapport à la pression et V_0 le volume à l'équilibre de la maille élémentaire.

Les résultats obtenus sont montrés dans les graphes (II.1), on peut conclure facilement que la structure la plus stable pour les alliages étudiés FeVSb, est de type α .

Les valeurs des paramètres de maille a , le module de compression B_0 , sa dérivée B'_0 et l'énergie minimale E_0 sont regroupées dans le tableau (II.2).

Tableau. II. 2 : Constante de réseau optimisée a (Å), module de compression B_0 (GPa), sa dérivée B'_0 et l'énergie minimale E_0 et l'énergie de gap de l'alliage FeVSb.

Composés	a_0 (Å)	B_0	B'_0	E_0	E_g (eV)
Phase α	5.7958	160.9	5.4263	-17411.5323	0.333
Autre traveaux	5.7976 ^{a,b,c} 5.78 ^d	156.13 ^{a, b,c}	4.90 ^a		---
Phase β	5.9260	137.72	3.8012	-17411.4195	---
Phase γ	6.10	98.2	4.02	-17411.387191	---

Du tableau II.2, le matériau à la phase α a l'énergie la plus basse $E_0 = -17411.5323$ eV.

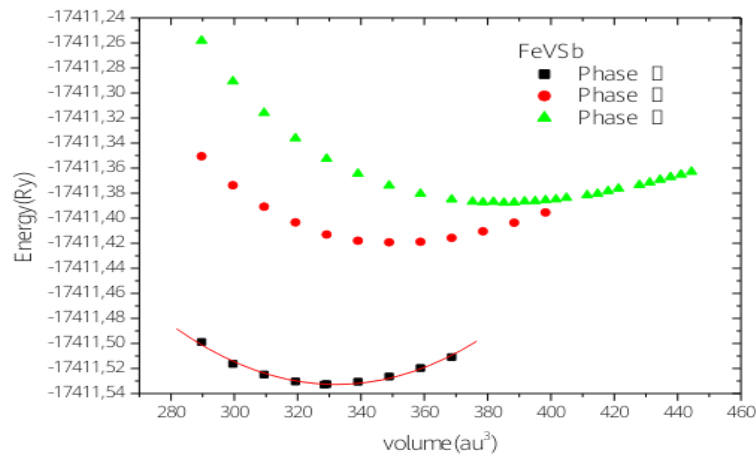


Figure. II. 1 Énergie totale en fonction du volume pour FeVSb.

II.4. propriétés électroniques :

En utilisant le paramètre de réseau d'équilibre calculé dans la section précédente, et par l'approximation GGA, la structure de bandes électroniques de *FeVSb* dans le types α a été obtenues le long des directions de haute symétrie dans la zone de Brillouin pour les bandes majoritaires et minoritaires.

Résultats et discussions

Les résultats sont donnés dans la figure (II.2).

Les résultats montrent que pour la structure bande électronique dans la direction des spins minoritaires, il existe un gap entre les bandes de valence et les bandes de conduction au niveau de l'énergie de Fermi, qui présentent un comportement semi-conducteur. La structure de bande électronique dans la direction des spins majoritaires présente aussi un comportement semi-conducteur, et possède un gap indirect, avec bande de valence maximale dans l'intervalle ($\Gamma - X$), et une bande de conduction minimale (aux point L).

Les valeurs de l'énergie de gap pour le composé FeVSb est représentée dans le tableau (II.2). Il est conclu que le composé FeVSb pour la structure de type α possède un comportement semi-conducteur.

Afin de comprendre les structures électroniques de l'alliages *FeVSb* de type α par l'approximation GGA, la densité totale d'états de polarisation de spin (TDOS) et les densités partielles (PDOS) à l'état stable sont calculées et tracées dans la figure (II.2.) dans l'intervalle d'énergie compris entre -6 et 6 eV.

Les résultats obtenus (DOS) de FeVSb, montrent un comportement semi-conducteur, confirmant ainsi nos précédents résultats présentés à la figure (II.3).

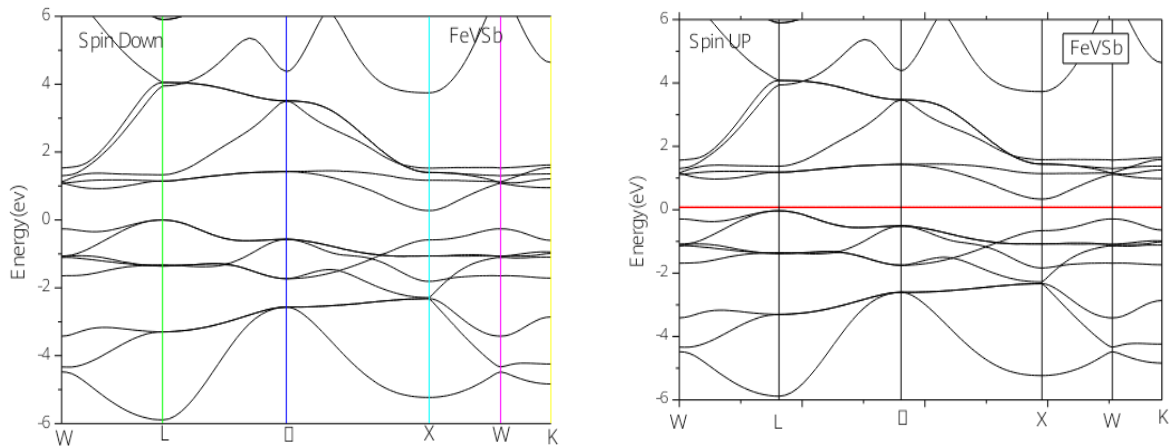


Figure. II. 2 : Structure de bandes du composé FeVSb dans le type α pour des spins minoritaires et majoritaires.

Résultats et discussions

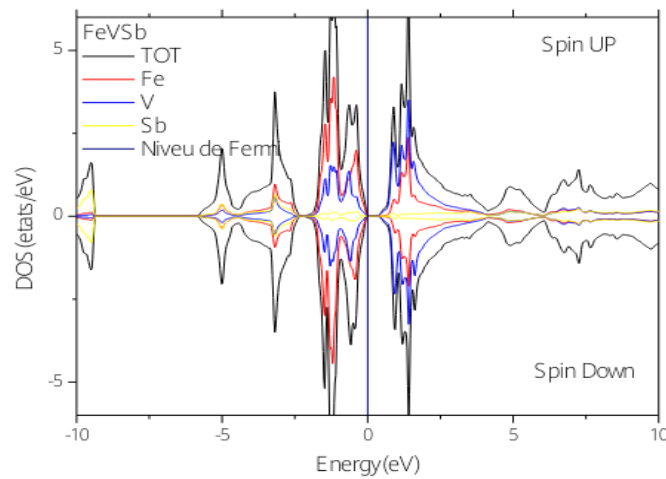


Figure. II. 3 : Densités des états totales et partielles pour l'alliage semi Heusler FeVSb dans le type α .

II.5. Propriétés magnétiques :

Dans cette section nous avons calculé les moments magnétiques locaux et totaux dans la région interstitielle et sphérique pour le types de structures α de *FeVSb* avec l'approximation GGA. Les résultats sont présentés dans le **tableau II.3**.

Le moment magnétique total de spin de la structure de type α est égal à $1\mu_B$ par unité de formule, pour l'alliage FeVSb.

Tableau. II. 3 : Moments magnétiques locaux μ (μ_B) des atomes en différents sites, moments magnétiques totaux μ_{total} (μ_B) et énergie de gap E_g (eV) pour FeVSb dans les types α .

	M_T	M_{FE}	M_V	M_{SB}	M_{INT}
notre travail	-0.00207	-0.00339	-0.00284	0.00273	0.00143
Autre travaux	-0.00029 ^{a.b}				

Pour la structure α , le moment magnétique du spin total est de $0.0026\mu_B$, pour l'alliage FeVSb. La contribution principale provient de l'atome de Fe, comme indiqué dans le tableau II.3. Ces valeurs du moment magnétique total de spin confirment le caractère semi-conducteur FeVSb dans la structure α .

II.6. Effet de la pression :

La pression hydrostatique est décrite par l'équation d'état de Murnaghan suivante :

Résultats et discussions

$$P = \frac{B_0}{B_0} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right]$$

Où V_0 et V sont le volume de la cellule unitaire à pression nulle et sous pression respectivement, B_0 est le module de compressibilité et sa dérivée B'_0 .

Par conséquent, la constante de réseau en fonction de la pression sera :

$$a(p) = a_0 \left[1 + P \left(\frac{B'_0}{B_0} \right) \right]^{-\frac{1}{3B'_0}}$$

Où a_0 est le paramètre de réseau d'équilibre de la maille unitaire.

Dans cette partie, Pour voir l'effet de la pression sur les propriétés magnétique de semi heusler FeVSb. Pour cela nous avons tracé le moment magnétique en fonction de la pression, et le résultat est présenté sur la figure II.4.

Dans la figure II.4 Le moment magnétique m_T est tracé en fonction de la pression dans un intervalle de 10GPa à 50GPa. Le résultat montre que le moment magnétique reste autour de $0.0\mu_B$, quelque soit la puissance de pression appliquée au alliage, ce qui prouve que le comportement magnétique de semi Heusler FeVSb ne change pas par l'effet de pression dans l'intervalle considéré.

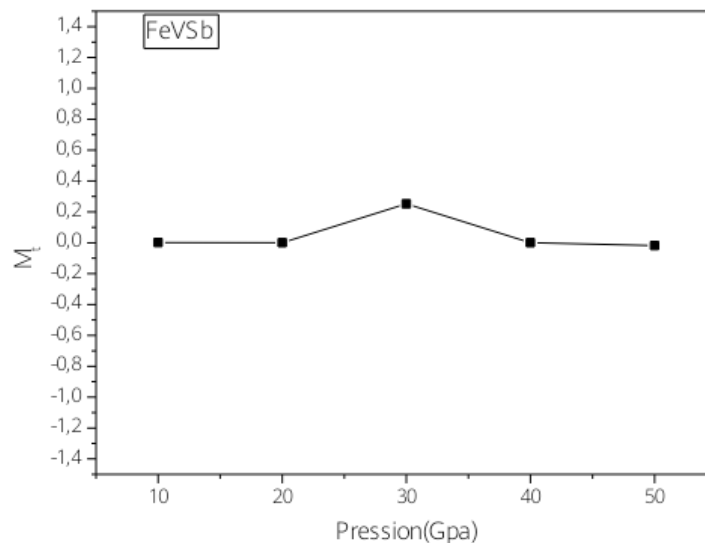


Figure. II. 4 : l'effet de la pression sur les propriétés magnétique de semi heusler FeVSb.

Résultats et discussions

II.7. Conclusion :

On a étudié dans ce chapitre l'un des matériaux les plus connus : les half -heuslers, où on a fait une étude complète sur différents types de structures, on a trouvé que la phase la plus stable est la phase α , puis on a fait des calculs pour les propriétés électronique et magnétique de cette dernière où on a trouvé que ce matériau est semi-conducteur à gap indirect , ce résultat confirmé par le moment magnétique total trouvé

En fin on a étudié effet de la pression où elle n'a pas aucun changement au niveau du moment magnétique.

Résultats et discussions

Bibliographie :

- [1]. Shrivastava D., Sanyal S.P., *J. Alloys Compd.*, 2018, 745, 240–246,
- [2]. Nanda B.R.K., Dasgupta I., *J. Phys.: Condens. Matter*, 2003, 15, 7307–7323,
- [3]. Graf T., Felser C., Parkin S.S.P., *Prog. Solid State Chem.*, 2011, 39, 1–50,.
- [4]. De Groot R.A., Mueller F.M., van Engen P.G., Buschow K.H.J., *Phys. Rev. Lett.*, 1983, 50, 2024,
- [5]. Kervan S., *Solid State Commun.*, 2013, 155, 69–72,.
- [6]. Katsnelson M.I., Irkhin V.Yu., Chioncel L., Lichtenstein A.I., de Groot R.A., *Rev. Mod. Phys.*, 2008, 80, 315,.
- [7]. Mokhtari M., Dahmane F., Zekri L., Benalia S., Zekri N., *J. Supercond. Novel Magn.*, 2018, 31, No. 9, 2991– 2998,.
- [8]. Irkhin V.Yu., Katsnel'son M.I., *Usp. Fiz. Nauk*, 1994, 164, 705 (in Russian),.
- [9]. Žutić I., Fabian J., Das Sarma S., *Rev. Mod. Phys.*, 2004, 76, 323,
- [10]. Schmidt G., Ferrand D., Molenkamp L.W., Filip A.T., van Wees B.J., *Phys. Rev. B*, 2000, 62, R4790(R),.
- [11]. Ohno Y., Young D.K., Beschoten B., Matsukura F., Ohno H., Awschalom D.D., *Nature*, 1999, 402, 790,.
- [12]. Ameri M., Touia A., Khenata R., Al-Douri Y., Baltache H., *Optik*, 2013, 124, 570–574,.
- [13]. Gu J.-B., Wang C.-J., Cheng Y., Zhang L., Cai L.-C., Ji G.-F., *Comput. Mater. Sci.*, 2015, 96, 72–80

Conclusion générale

Conclusion générale

Conclusion générale :

Ce modeste travail a été consacré pour étudier les propriétés physiques d'une classe d'alliages appelée les alliages Semi Heusler FeVSb définie par la famille XYZ. L'objectif de ce mémoire est de prédire les propriétés structurales, électroniques, magnétiques de notre composé et voir l'effet de la pression.

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 de type α est plus stable dans ce composé.

Les propriétés électroniques montrent que le composé FeVSb présente un caractère semi-conducteur pour cette structure. L'exploitation des résultats fournis par l'étude des propriétés magnétiques établit que l'origine du magnétisme dans notre alliage semi Heusler provient principalement du métal de transition Fe.

Les résultats montrent aussi que la pression n'a aucune influence sur ce composé dans la gamme de pression de 10 GPa à 50 GPa

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, GGA+U, pour faire la comparaison entre certains de nos résultats.
- Etudier les propriétés élastiques et mécaniques de ces composés.

Résumé

Abstract:

Half-Heusler alloys are half-metallic magnets which may be defined as a new state of matter between insulating and metallic materials. These materials have many important applications in spintronics or magnetoelectronics devices. We have done first-principles (ab-initio) calculation of the magnetic moment and electronic structure for FeVSb half-Heusler compounds. All the calculations were performed using the DFT-based electronic structure package WIEN2K. semiconducting behavior have been found in the compound studied.

Keywords: Half-Heusler , DFT , FeVSb ,

Résumé

Les alliages semi-Heusler sont des aimants semi-métalliques qui peuvent être définis comme un nouvel état de la matière entre les matériaux isolants et métalliques. Ces matériaux ont de nombreuses applications importantes dans les dispositifs de spintronique ou de magnétoélectronique. Nous avons effectué des calculs de premier principe (ab-initio) du moment magnétique et de la structure électronique pour les composés FeVSb demi-Heusler. Tous les calculs ont été effectués à l'aide du progiciel de structure électronique basé sur DFT WIEN2K. Comportement semi-conducteur ont été trouvés dans le composé étudié

Mots-clés : Demi-Heusler, DFT, FeVSb,

المخلص:

سبائك شبه هسلر عبارة عن مغناطيسيات شبه معدنية يمكن تعريفها على انها حالة جديدة للمادة بين المواد العازلة والمواد المعدنية. هذه المواد لها عدة تطبيقات مهمة في spintronique وفي الالكترونات المغناطيسية. لقد اجرينا حسابات المبدأ الأول (ab-initio) للعزم المغناطيسي و البنية الالكترونية للمركب شبه هسلر FeVSb . كل هذه الحسابات أجريت بالاعتماد على نظرية الدالة الوظيفية للكثافة DFT في برنامج WIEN2K. وقد تم العثور على سلوك شبه ناقل في المركب المدروس

الكلمات المفتاحية: شبه هسلر ، نظرية الدالة الوظيفية للكثافة