



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique
Université de Tissemsilt



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme
De Master académique en
Filière : **PHYSIQUE**
Spécialité : **NANO-PHYSIQUE**

Présentée par : **TAHRI Ahmed**

Thème

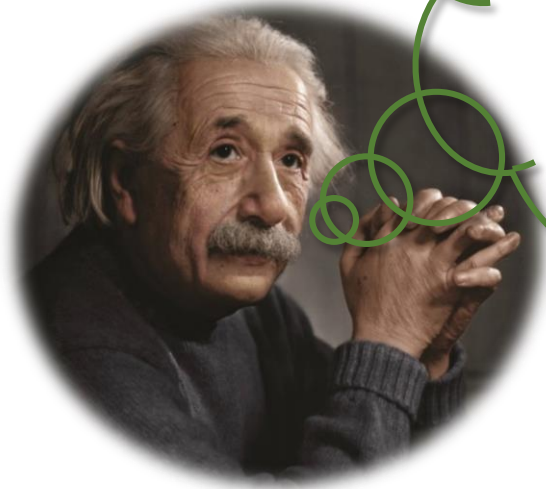
**Étude théorique sur les propriétés
physiques des composés Ti_2Co (Al, Ga)**

Soutenu le, 24/06/2021

Devant le Jury :

Mr. MOKHTARI Mohamed	President	M.C.A.	Univ-Tissemsilt
Mr. DAHMANE Fethallah	Encadreur	M.C.A.	Univ-Tissemsilt
Mr. BOUMIA Lakhdar	Examineur	M.C.A.	Univ-Tissemsilt

Année universitaire: 2020-2021



“La vie, c'est comme une bicyclette,
Il faut avancer pour ne pas perdre
L'équilibre.”

|Albert EINSTEIN|

Remerciements

Remerciements

*Je remercie **ALLAH** le tout-puissant qui m'a offert la santé, le courage, la patience et la volonté, me permettant de mener à terme ce présent travail. Je remercie très sincèrement mon encadreur Dr **Dahmane Fethallah** de m'avoir proposé ce thème et de m'avoir dirigé à travers sa perspicacité et ses conseils qui m'ont été d'une grande utilité dans la rédaction de ce mémoire, mais surtout d'avoir consacré son temps pour mettre à ma disposition tout outil nécessaire.*

*Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux membres de jury : Dr **Mokhtari.M** (Président) et Dr **Boumia.L** (Examineur) pour avoir accepté de m'honorer pour l'évaluation de ce travail.*

Mes plus sincères remerciements vont également à :

Tous les enseignants du Département des sciences de la matière de l'université de Tissemsilt pour leur vif accompagnement durant ces cinq années d'études.

Que tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin durant toute ma formation, trouvent ici mes remerciements les plus sincères et ma reconnaissance la plus profonde.

Dédicaces

Je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chers.

À LA MEMOIRE DE MON PERE.

*Ce travail est dédié à mon père, qui restera une source
d'inspiration pour moi. Puisse Dieu, le tout-puissant,
l'avoir en sa sainte miséricorde !*

À MA CHERE MERE.

*Que ce modeste travail reçoit ta bénédiction tant sollicitée, soit
l'exaucement de tes vœux tant formulés et le fruit de tes
interminables sacrifices.*

A mes frères, mes sœurs et leurs familles.

A ma femme et mon adorable fille Aicha.

Aux étudiants du Master 2 Nano physique.

A tous mes amis.

TAHRI Ahmed

Listes des abréviations et des sigles

Liste des abréviations et des sigles :

Fig : figure

Tab : tableau

DFT : Théorie de la fonctionnelle de la densité (**D**ensity **F**unctional **T**heory).

GMR : magnétorésistance géante (**G**iant **M**agneto**r**esistance **E**ffect)

SRAM : mémoire vive statique (**S**tatic **R**andom **A**ccess **M**emory).

DRAM : mémoire vive dynamique (**D**ynamic **R**andom **A**ccess **M**emory).

FP-LAPW : L'onde plane Augmentée linéarisée à potentiel total (**F**ull **P**otential **L**inearized **A**ugmented **P**lane **W**aves).

DOS : Densité d'états (**D**ensity **O**f **S**tates).

HMF : demi-métallique ferromagnétique (**H**alf-**M**etallic **F**erromagnetic).

TMR : magnétorésistance tunnel (**T**unnel **M**agneto**r**esistance).

MRAM : mémoire vive magnétique (**M**agnetic **R**andom **A**ccess **M**emory).

I.U.P.A.C : Union internationale de chimie pure et appliquée (**I**nternational **U**ion of **P**ure and **A**ppplied **C**hemistry).

GGA : Approximation du gradient généralisé (**G**radient **G**eneralized **A**pproximation).

RMT : **R**ayon **M**uffin-**T**in.

E_{Tot} : **E**nergie **T**otale.

cfc : cubique à faces centrées.

MT : **M**uffin-**T**in.

B₀ : Module de compressibilité (**B**ulk modulus).

B'₀ : First derivative of Bulk modulus.



SOMMAIRE

Sommaire

Sommaire :

Liste des figures :.....	i
Liste des tableaux :.....	iii
Introduction générale :	1
Références bibliographiques :	3
Chapitre I : Généralités sur les Heusler	4
I.1 .Introduction :.....	4
I.2. Classification des alliages d'Heusler :	5
I.2.1. Les alliages demi-Heusler :	5
I-2-2.Les alliages Heusler (Full-Heusler) :.....	6
I.2.3.les alliages Heusler Quaternaires (Quaternary Heusler) :	7
I.3. Propriétés structurales et phénomènes ordre-désordre :.....	7
I.4.Différents comportements magnétiques :	9
I.4.1.Diamagnétisme :	10
I.4.2.Paramagnétisme :	10
I.4.3.Ferromagnétisme :	10
I.4.4.Ferrimagnétisme :	10
I.4.5.Antiferromagnétisme :	10
1.5. Alliages Heusler et le magnétisme :.....	11
I.5.1 : Règle de Slater-Pauling :	12
I.5.2.Demi-métalicité des alliages d'Heusler :	13
I.6. la spintronique.....	16
I.6.1.applications de la spintronique :	17
I.7.Les métaux de transition	19
I.7.1.définition :	19
I.8.L'aluminium et le Gallium	20
I.8.1.Propriétés générales :	21
1.8.2.Structure cristallographique :	21
Chapitre II : Résultats et discussion	25
II.1.Détail de calculs :	25
II .2. La structure cristalline des alliages d Heusler :.....	26
II .3. Les Propriétés Structurales :.....	27
II.3.1. Etat d'équilibre et la stabilité structurale :	27

Sommaire

II.4. Propriétés électroniques :	30
II.4.1. Densité d'états :	30
II.4.2. La structure de bande :	33
II.5. Propriétés magnétiques :	38
Références bibliographiques :	40
Conclusion générale :	41

Liste des figures

Liste des figures :

Fig. I. 1: Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs.....	4
Fig. I. 2: Structure de demi-Heusler.....	6
Fig. I. 3: Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler): a) régulière; b) inverse.....	7
Fig. I. 4: Les différents types de désordre pouvant survenir dans la structure (half/full) Heusler.(a)désordre de type Cu_2MnAl , (b) désordre de type CsCl , (c) désordre de type CaF_2 , (d) désordre de type NaTl , (e) désordre de type BF_3 , (f) désordre de type tungstène.....	9
Fig. I. 5: (a) composé demi-Heusler de la formule XYZ (structure C1b) (b) composé full-Heusler de formule X_2YZ (structure L21).....	12
Fig. I. 6: Courbe de Slater-Pauling représentant le moment magnétique total en fonction du nombre d'électron de valence total (N_v) pour les alliages Full-Heusler .	13
Fig I. 7: Structure de bandes pour un matériau (a) ferromagnétique conventionnel et (b) demi-métallique.....	14
Fig I. 8: Illustration schématique de la densité des états (a) d'un métal, (b) semi-métal, (c) un métal (spin polarisé), (d) un ferromagnétique, (e) un ferromagnétique demi-métallique, et (f) un ferrimagnétique demi-métallique.....	14
Fig I. 9: représentation schématique des densités d'états et polarisation en spin d'un métal non ferromagnétique (A), d'un matériau ferromagnétique (B) et d'un matériau demi-métallique(C).	16
Fig. I. 10: Concept de la spintronique.	17
Fig. I. 11: les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.	18
Fig. I. 12: les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.	18
Fig. I. 13: métaux de transition dans le tableau périodique.....	20
Fig. I. 14: Aluminium (à gauche). Gallium (à droite).	20
Fig. II. 1. a : Structure cristalline de Ti_2CoAl (à gauche) et Ti_2CoGa (à droite) dans la phase Hg_2CuTi	26
Fig. II. 1. b : Structure cristalline de Ti_2CoAl (à gauche) et Ti_2CoGa (à droite) dans la phase Cu_2MnAl	27
Fig. II. 2. a : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de Ti_2CoAl dans les deux phases structurales Cu_2MnAl et Hg_2CuTi	28
Fig. II. 2. b : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de Ti_2CoAl dans les deux phases structurales Cu_2MnAl et Hg_2CuTi	29

Liste des figures

Fig. II. 3. a : Les densités d'états, totaux et partiels du composé $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$	31
Fig. II. 3. b : Les densités d'états, totaux et partiels du composé $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$	32
Fig. II. 3. c: Les densités d'état, total et partiel du composé $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$	32
Fig. II. 3. d: Les densités d'états, totaux et partiels du composé $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$	33
Fig. II. 4. a : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$ (Up).	35
Fig. II. 4. b : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$ (Down).	35
Fig. II. 4. c : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$ (Up).	36
Fig. II. 4. d: La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$ (Down).	36
Fig. II. 4. e : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$ (Up).	37
Fig. II. 4. f : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$ (Down).	37
Fig. II. 4. g : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$ (Up).	38
Fig. II. 4. h : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$ (Down).	38

Liste des tableaux

Liste des tableaux :

Tableau I. 1. Différents types d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type C1b.....	6
Tableau I. 2 : Résumé des différents types de comportement magnétique.....	11
Tableau. I. 3 : Propriétés générales de l'Aluminium et du Gallium.....	21
Tableau II. 1. : Le paramètre du réseau $a(\text{Å})$, le module de compressibilité B_0 et sa première dérivée par rapport à la pression B'_0 pour les deux phases structurales Cu_2MnAl et Hg_2CuTi	29
Tableau II. 2. a : Le moment magnétique total $M_{\text{Total}} (\mu\text{B})$, avec les moments magnétiques ; interstitiel et partiels des atomes du composé Ti_2CoAl	39
Tableau II. 2. b : Le moment magnétique total $M_{\text{Total}} (\mu\text{B})$, avec les moments magnétiques interstitiels et partiels des atomes du composé Ti_2CoGa	39



**INTRODUCTION
GÉNÉRALE**

Introduction générale

Introduction générale :

L'utilisation correcte des matériaux est précurseur du progrès technologique rapide, il est donc nécessaire de se pencher sur leur modélisation, la connaissance fondamentale de leur structure et de leurs diverses propriétés structurales, électroniques, magnétiques vibrationnelles, mécaniques, élastiques, optiques et thermoélectriques.

L'implémentation aux théories de la physique du solide des outils et des méthodes informatiques permet de comprendre l'organisation de la matière à l'échelle atomique et de modéliser des composés réels à structures éventuellement complexes qui deviennent parfaitement envisageables dans des délais qui restent « raisonnables ».

Les méthodes de simulation ab-initio basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont donné une nouvelle dimension à l'investigation scientifique en remplaçant l'expérience parfois coûteuse, dangereuse où même inaccessible au laboratoire. Elles trouvent d'ailleurs un domaine d'application grandissant en sciences des matériaux grâce à l'amélioration constante des puissances de calcul et des développements théoriques de ces dernières décennies. Elles ont abouti à la production d'un grand nombre de matériaux utilisés actuellement dans l'industrie et dans les nouvelles technologies.

Les classes des alliages Heusler, de formule générale XYZ (Half-Heusler), X₂YZ (Full-Heusler), XX'YZ (Quaternary-Heusler), où X, X', Y sont des métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique[1], n'ont pas seulement un nombre infini de composés, mais aussi une grande variété de propriétés allant de semi-conducteurs ferromagnétiques, demi-métalliques, supraconducteurs et isolants topologiques de mémoire. [2]

Ces propriétés intéressantes trouvent leur place dans les applications pratiques comme les domaines magnéto-électronique et spintronique [3,4], les dispositifs d'injection de spin [5], les filtres à spin [6], les jonctions de tunnels [7] ou les dispositifs GMR [8, 9] en raison de leur haute température de Curie [10].

Le caractère demi-métallique leur confère un intérêt prometteur dans l'électronique de spin (spintronique).

Avec la spintronique les transistors pourront atteindre la taille de quelques atomes. La prochaine génération de processeurs ou de mémoires combineront tous les avantages des technologies existantes (SRAM, DRAM et Flash) sans leurs inconvénients. Cette discipline, qui se situe à la frontière entre

Introduction générale

magnétisme et électronique, étudie une propriété des électrons auparavant inexploitée : leur rotation (spin, en anglais). En effet, dans l'électronique classique qui utilise les semi-conducteurs «classiques », on manipule la charge électrique des électrons pour transmettre l'information. La spintronique tire aussi parti de leur spin (magnétisme) comme un nouveau degré de liberté pour créer des fonctionnalités nouvelles [11].

L'objectif de ce mémoire est une contribution théorique à une meilleure compréhension des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés Heusler Ti_2Co (Al, Ga).

Dans ce travail on a réalisé les résultats de calculs par la méthode ab-initio avec le code Wien2k, qui est basé sur la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la DFT à partir de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) implémentée dans ce code.

Ce travail est structuré comme suit :

- ✓ Introduction générale.
- ✓ Chapitre I : présente des généralités sur les alliages d'Heusler et leurs propriétés.
- ✓ Chapitre II : présente et discute les résultats des calculs ab-initio.
- ✓ Conclusion générale : récapitule l'essentiel des points abordés et liste les résultats les plus marquants.

Introduction générale

Références bibliographiques :

- [1] I.BARKAT « Etude du premier principe des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et élastiques des composés : CoVTiX ($X=\text{As}, \text{Si}$) », Msila, Université MOHAMED BOUDIAF, Mémoire de Master (2017).
- [2] A.BAHNES « Les propriétés structurales, électroniques, optiques et magnétiques des alliages de type Heuslers : Étude de premiers principes », Mostaganem, Université ABDELHAMID IBN BADIS, Thèse de Doctorat (2018).
- [3] R.A.Groot, F.M.Mueller, P.G.van Engen and K. H.J.Buschow, Phys. Rev. Lett, 50, pp. 2024–2027 (1983).
- [4] M.Julliere, Phys. Lett, A54, pp. 225–226 (1975).
- [5] R.Pandey, J.E.Jaffe and A.B Kunz, Phys. Rev, B43, pp. 9228–9237 (1991).
- [6] Y.Miura, H.Uchida, Y.Oba, K.Abe and M.Shirai, Phys. Rev. B78, pp. 064416(1-10) (2008).
- [7] B.Hülsen, M.Scheffler, P.Kratzer, Phys. Rev, B79, pp. 094407(1-9) (2009).
- [8] S. Yuasa, A. Fukushima, H. Kubota, Y. Suzuki, K. Ando, Appl. Phys. Lett, 89, pp 042505(1-3) (2006).
- [9] S.S.P.Parkin, C.Kaiser, A.Panchula, P.M.Rice, B.Hughes, M.Samant and S.H. Yang, Nat. Mat, 3, pp. 862–867 (2004).
- [10] I.Zutic, J.Fabian and S.D.Sarma.. Rev. Mod. Phys, 76, pp. 323-410 (2004).
- [11] A.BADAOU, « Origine du ferromagnétisme dans l'AlN dopé par du Mg », Tlemcen, Université ABOUBAKR BELKAID, Thèse de magister. (2008).

CHAPITRE I :
GÉNÉRALITÉS
SUR LES
HEUSLERS

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

I.1 .Introduction :

Les alliages Heusler représentent une des classes de matériaux les plus passionnants, dont l'histoire remonte à **1903** ou **Fritz Heusler** a découvert un alliage de formule chimique Cu_2MnAl se comportant comme un matériau ferromagnétique bien que ses éléments constitutifs ne soient pas magnétiques en soi [1,2].

Depuis la découverte de la demi-métallicité ferromagnétique des alliages Heusler, ces derniers sont devenus un domaine d'intérêt de la recherche pour les applications de l'électronique de spin [3].

Cette classe de matériaux compte actuellement dans sa gamme plus de 3000 composés appelés alliages Heusler. Ce sont des composés ternaires ou même quaternaires qui grâce à un large éventail de propriétés peuvent avoir le comportement de demi-métaux, de semi-conducteurs, de supraconducteurs et bien d'autres. On décrit deux groupes :

Les demi-Heuslers avec une formule chimique XYZ (stœchiométrie 01 :01 :01).

Les full-Heuslers avec une composition X_2YZ (stœchiométrie 02 :01 :01), où X, Y sont des éléments de transition et Z est un élément des groupes III, IV ou V.

Les combinaisons possibles de ces éléments sont illustrées dans la figure I-1 :

X_2YZ Heusler compounds

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

Fig. I. 1: Tableau périodique des éléments. Un grand nombre d'alliages Heusler peut être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs [4]

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

En comptant simplement les électrons de valence on peut prétendre des propriétés de certains Heuslers ; ceux non magnétiques avec 27 électrons de valence sont supraconducteurs.

Plus de 250 combinaisons sont considérées comme de nouveaux matériaux dans les technologies de l'énergie. En modifiant simplement leur structure chimique, la largeur de bande varie de 0 à 4 eV, ce qui fait d'eux des candidats potentiels pour les applications des cellules solaires et les applications thermoélectriques [5,6].

I.2. Classification des alliages d'Heusler :

I.2.1. Les alliages demi-Heusler :

Les alliages demi-Heusler sont définis par la formule chimique XYZ avec une stœchiométrie (1 :1 :1) ; ces alliages sont conçus comme des composés constitués de deux parties, une partie covalente et l'autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, alors que Z, de valence sp, peut être considéré comme l'équivalent anionique [7,8,9]. Les éléments X et Y peuvent être des éléments d'un groupe principal, des métaux de transition ou des éléments des terres rares. L'élément Z est un élément d'un groupe principal qui est plus électronégatif comme le Ge, Sn, Sb.

Les alliages demi-Heusler cristallisent dans une structure cubique non-centro- symétrique (groupe spatial numéro 216, F-43m, C1b) [7] qui peut être dérivée de la structure tétraédrique de type ZnS par un remplissage des sites octaédriques du réseau où deux éléments forment une structure NaCl et le troisième occupe quatre sites tétraédrique du réseau (1/4,1/4,1/4). Ce type de structure peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées, dont chacun est occupé par les atomes X, Y et Z [10]. Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4).

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

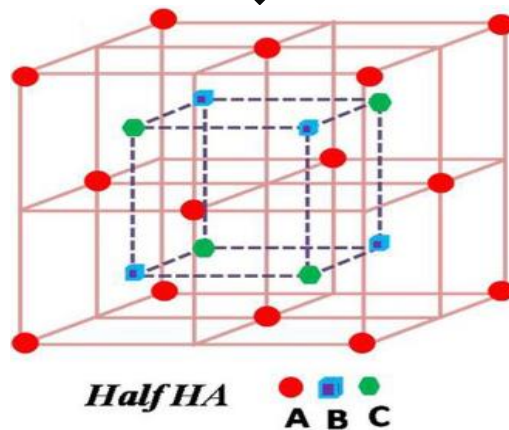


Fig. I. 2: Structure de demi-Heusler.

On trouve, trois arrangements atomiques différents et possibles dans ce type de structure comme indiqué dans le tableau suivant :

Tableau I. 1. Différents types d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type C1b.

	4a (0, 0,0)	4b (1/2,1/2,1/2)	4c (1/4,1/4,1/4)
Type I	X	Y	Z
Type II	Z	X	Y
Type III	Y	Z	X

I-2-2. Les alliages Heuslers (Full-Heuslers):

Définis par leur formule générale X_2YZ avec une stœchiométrie (2 :1 :1), où X et Y sont souvent des métaux de transition et Z est un élément non magnétique du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Dans des cas rarissimes, l'élément Y peut être remplacé soit par un élément des terres rares, soit par un métal alcalino-terreux. Ces composés cristallisent dans la structure cubique dans le groupe d'espace cubique $Fm-3m$ (groupe d'espace N° 225)[7], avec un prototype Cu_2MnAl noté souvent (L21) Dans ce prototype les atomes X occupent les sites tétraédriques 4c (1/4, 1/4, 1/4), les atomes Y se trouvent au niveau des sites octaédriques 4b (1/2,1/2,1/2) et les atomes Z sont placés au sommet 4a (0, 0, 0) et au centres des faces.[11].

En plus de la structure décrite ci-dessus, une structure Heusler inverse est observée, si le numéro atomique de Y est plus élevé que celui de X de la même période ($Z(Y) > Z(X)$) [12]. Souvent, cette structure inverse est désignée par le prototype $CuHg_2Ti$. Cette structure cristallise dans le groupe d'espace cubique $F-43m$ (groupe d'espace N° 216) [7].

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

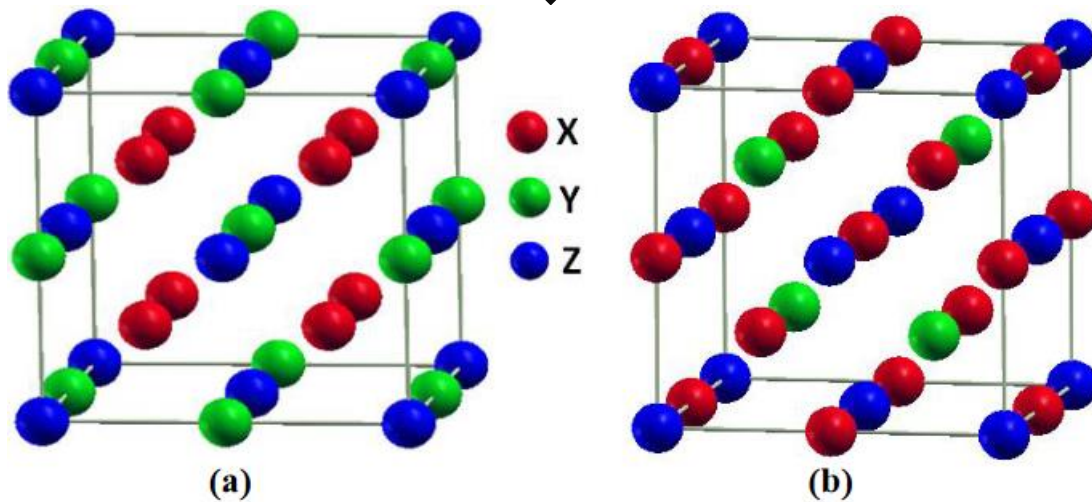


Fig. I. 3: Les deux structures d'Heusler (Full-Heusler): a) régulière; b) inverse.

I.2.3.les alliages Heuslers Quaternaires (Quaternary Heuslers) :

Il existe une autre famille d'Heusler ; les composés Heusler quaternaires, où il y a quatre atomes de nature chimique différentes, dont 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'). X et X' sont situés dans les positions 4a et 4d, respectivement. L'élément Y est placé sur les positions 4b tandis que l'élément Z sur les positions 4c. Cette structure présente le prototype LiMgPdSn et cristallise dans le groupe d'espace cubique F-43m (groupe d'espace N° 216). [13,14].

I.3. Propriétés structurales et phénomènes ordre-désordre :

Les propriétés des alliages Heusler sont décrites par leur arrangement atomique, dont une modification partielle dans l'empilement peut conduire à une autre structure électronique.

Les alliages demi-Heusler sont des structures tétraédriques remplies, et de même ils sont liés aux semi-conducteurs binaires à une certaine limite. L'interaction de liaison covalente est importante dans ces composés, et leur ordre cristallin est conservé à la température de composition [15]. Il est très rare qu'un composé demi-Heusler ait un désordre structural qui conduit à une occupation des sites de réseau vacants. Les alliages X₂YZ présentent souvent des désordres atomiques mais, ils adoptent des phases partiellement désordonnées telles que les phases B₂, DO₃ ou bien complètement désordonnées dans le cas de la phase A₂ (fig. I.4). Quand les atomes X occupent leurs sites respectifs, définis ci-dessus, alors que le désordre complet se produit seulement entre les sites des atomes Y et Z, la structure B₂ est obtenue. Dans le cas de la phase DO₃, il existe un échange de sites entre les atomes de X et les atomes Y et enfin, si tous les sites sont occupés aléatoirement par les atomes de

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

X, Y et Z, cette phase est nommée A2. Ce désordre peut être mesuré directement par diffraction de rayons X. Cette structure L21 est hautement désirable pour certains alliages full-Heusler. La température de transition ordre-désordre est un facteur important pour obtenir un haut degré d'ordre dans les alliages Heusler. Cette température de transformation ordre-désordre a été étudiée pour plusieurs composés Heusler à base de Co [16,17].

Généralement dans les alliages Heusler, les atomes s'arrangent sous plusieurs phases cristallographiques en fonction de l'ordre des atomes au sein de la maille cristalline, on distingue alors [7,8] :

- ♣ La phase L21 de type Cu_2MnAl : où tous les atomes sont parfaitement ordonnés.
- ♣ La phase B2 de type CsCl , où les sites correspondants aux atomes Y et Z sont occupés d'une manière aléatoire par ces deux atomes.
- ♣ La phase C1 de type CaF_2 , les sites correspondants aux atomes X et Z sont occupés d'une manière aléatoire par ces deux atomes.
- ♣ La phase B_32a de type NaTl où les atomes X qui occupent le réseau cfc, sont mélangés avec les atomes Y, alors que les atomes X sur les sites tétraédriques sont mélangés avec les atomes Z.
- ♣ La phase DO_3 de type BF_3 , les atomes X et Y ou les atomes X et Z sont distribués de façon aléatoire.
- ♣ La phase A2 de type W (tungstène) : où tous les sites atomiques sont occupés par hasard par les trois types d'atomes.

Les six phases sont représentées sur la figure suivante [Fig.I.4] :

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

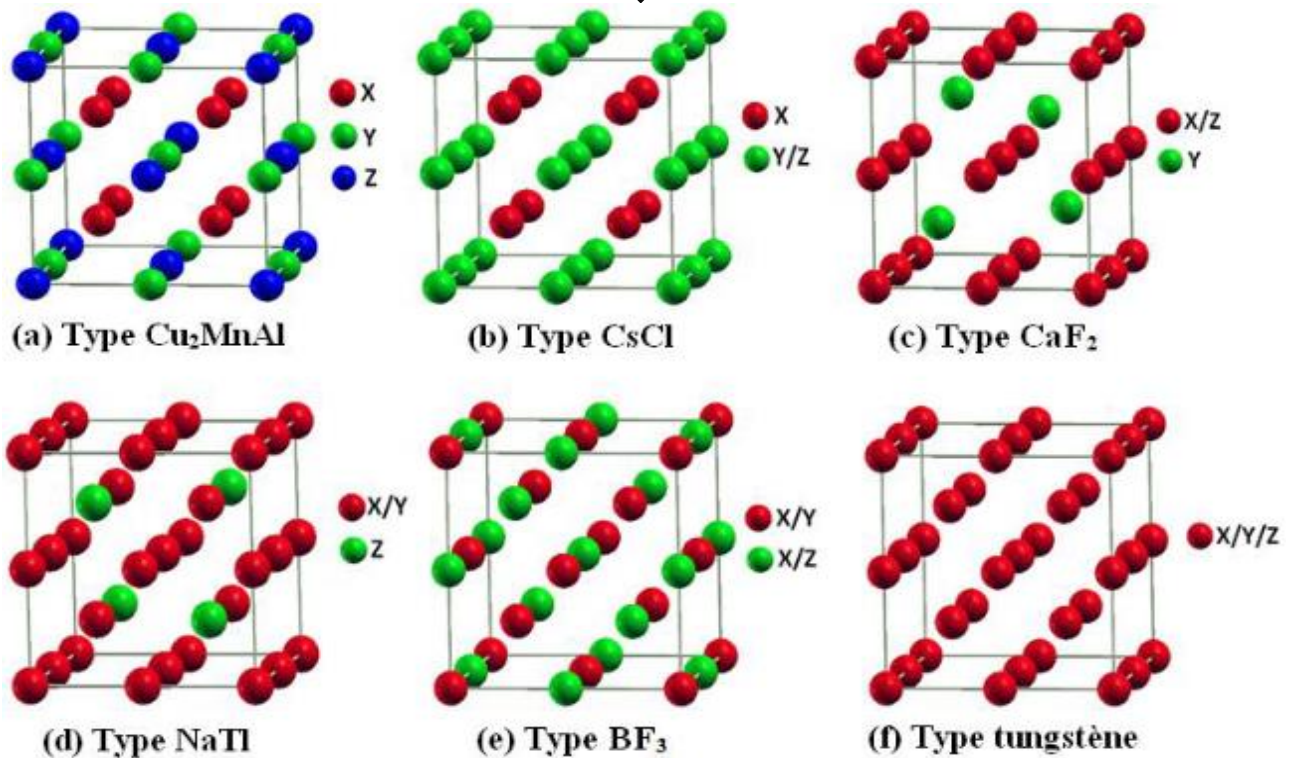


Fig. I. 4: Les différents types de désordre pouvant survenir dans la structure (half/full) Heusler. (a) désordre de type Cu_2MnAl , (b) désordre de type CsCl , (c) désordre de type CaF_2 , (d) désordre de type NaTi , (e) désordre de type BF_3 , (f) désordre de type tungstène.

Remarque : le type désordre CaF_2 est observé seulement pour les demi-Heusler, tandis que le type désordre BF_3 est observé pour les full-Heusler.

L'ordre cristallographique peut provoquer des modifications significatives sur les propriétés magnétiques des alliages Heusler comme l'aimantation à saturation et la température de Curie, ainsi que sur les propriétés électroniques.

I.4. Différents comportements magnétiques :

Le magnétisme est l'ensemble de phénomènes que manifestent des matériaux repoussés ou attirés par effet d'un champ magnétique externe.

Cette propriété générale de la matière est frappante dans certains matériaux appelés matériaux magnétiques. Ce phénomène est dû aux spins des électrons et, aussi, aux moments magnétiques orbitaux.

Suivant le principe d'exclusion de Pauli et les règles de Hund, les électrons s'arrangent dans leur atome. Le moment magnétique de certains atomes comme le Fer, le Nickel ou le Cobalt, est non nul, même sous forme de massif ou d'alliage. L'aimantation \vec{M} , moment magnétique total par unité de

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

volume, est la grandeur macroscopique qui décrit le caractère magnétique d'un matériau. La susceptibilité magnétique χ est la grandeur qui décrit la réponse à un champ magnétique \vec{H} . [18]

I.4.1.Diamagnétisme :

Les métaux diamagnétiques sont faiblement susceptibles aux champs magnétiques, ils ne conservent pas les propriétés magnétiques lorsque le champ magnétique extérieur est supprimé. La majorité des éléments du tableau périodique, y compris : le cuivre, l'argent et l'or sont diamagnétiques. [18]

I.4.2.Paramagnétisme :

Le paramagnétisme, relève d'une susceptibilité positive faible qui se manifeste dans le matériau ayant des atomes à moment magnétique permanent comme somme des spins électroniques et des moments magnétiques orbitaux. Le paramagnétisme est sensible à la température. La plupart des gaz, certains métaux (Al, Mn, W), et les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques lorsque leur température dépasse le point Curie propre sont paramagnétiques. [18]

I.4.3.Ferromagnétisme :

Les matériaux ferromagnétiques ont une susceptibilité grande et positive, ils conservent leurs propriétés magnétiques après suppression du champ magnétique externe. Ils possèdent quelques électrons non appariés, et leurs atomes ont un moment magnétique net. Le fer, le nickel et le cobalt sont des exemples de métaux ferromagnétiques. Des pièces, réalisées avec de tels métaux, sont habituellement contrôlées par magnétoscopie. . [18]

I.4.4.Ferrimagnétisme :

Le ferrimagnétisme est caractéristique des ferrites. Leur structure est faite de deux réseaux cristallins A et B, avec des moments magnétiques m_A et m_B antiparallèles et différents. Leur aimantation spontanée diminue à l'élévation de la température. Au-dessus de la température de Curie ces matériaux deviennent paramagnétiques. Leur conductivité est très faible. Les ferrites sont douces et durs. Du point de vue mécanique, les ferrites sont dures et cassants. [18]

I.4.5.Antiferromagnétisme :

De même structure comme les matériaux ferrimagnétiques, ces matériaux possèdent des moments m_A et m_B égaux en module à 0 K. L'alignement des moments est perturbé par l'agitation thermique et la susceptibilité magnétique χ_m croît jusqu'à une température Θ_N appelée température de Néel, au-dessus de laquelle, ces matériaux deviennent paramagnétiques. Les matériaux avec la température Néel basse (70...293) K sont utilisés pour la réalisation des circuits magnétiques avec réluctance élevée. [18].

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Tableau I. 2 : Résumé des différents types de comportement magnétique. [19]

Type	carctéristique	Comportement	Atomique
Diamagnetique	non magnetique) (pas d'intercation)	Les atomes n'ont pas de moment magnétique. La susceptibilité est petite & négatif, -10^{-6} à -10^{-5}	
Paramagnetique	(magnetique)(les moments désordonnés dans toutes les directions)(pas d'intercation)	Les atomes ont des moments magnétique oriente au hasard. La susceptibilité est petite & positif, $+10^{-5}$ à $+10^{-3}$	
Ferromagnetique	magnetique) (ordonnés parallèlement) (intercation) distance plus (AFM) Mot≠ 0	les moments magnétique sont parallèles magnétique aligné des moments. La susceptibilité est grande (sous T_C)	
Anti-ferromagnetique	magnetique) Mot= 0 (ordonnés antiparallèlement) (intercation) distance siuffisamment petites	Sont alignés Moments magnétiques. La susceptibilité est petite & positif, $+10^{-5}$ à $+10^{-3}$	
Ferrimagnetique	(atomes mag ayant des M différents) Mot≠ 0 (ordonnés antiparallèlement) (interaction)	moments magnétiques. La susceptibilité est grande (sous T_C)	

1.5. Alliages Heusler et le magnétisme :

Les alliages manifestent des comportements magnétiques diversifiés qui reflètent la nature complexe des interactions d'échange dans ces systèmes. Cependant, la majorité des alliages Heusler sont ferromagnétiques et saturent pour de faibles champs magnétiques appliqués. L'apparition du ferromagnétisme et du caractère demi-métallique paraissent subtiles mais l'explication est très compliquée. D'après Galanakis et ses collaborateurs et selon le nombre d'atomes magnétiques présents dans la cellule élémentaire, plusieurs mécanismes d'échange sont susceptibles de coexister ; par exemple, dans les systèmes à base de Mn (X_2MnZ) le moment magnétique total est confié au Mn, le mécanisme d'échange indirect semble le plus probable l'hypothèse d'un couplage d'échange

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

indirect entre les atomes de Mn via les électrons de conduction permet d'expliquer qualitativement la nature du magnétisme pour ces systèmes. Cependant, dans plusieurs composés Heusler appartenant à la famille X_2MnZ ($X = Fe, Co, Ni, Rh$) les atomes X portent un moment magnétique substantiel. Dans ce cas, les choses se compliquent car il y a beaucoup d'interactions d'échange entre les différents atomes magnétiques dont chacune contribue à la formation de l'état magnétique d'une manière coopérative [20].

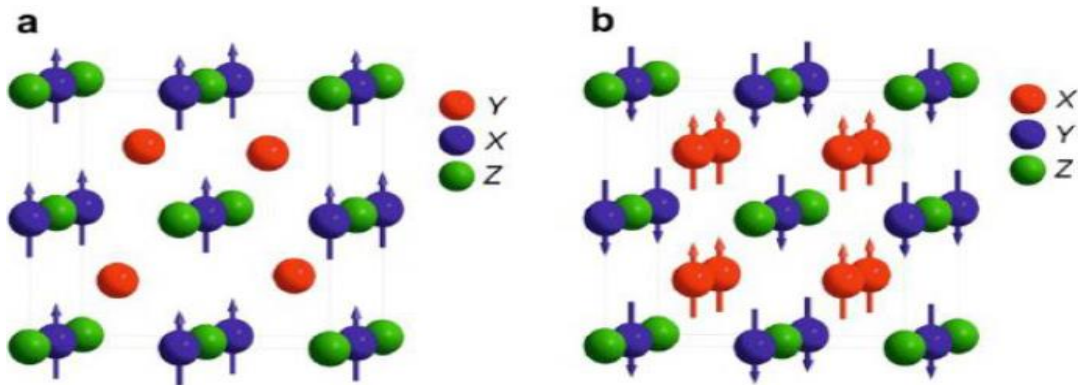


Fig. I. 5: (a) composé demi-Heusler de la formule XYZ (structure C1b) (b) composé full-Heusler de formule X₂YZ (structure L21) [21].

I.5.1 : Règle de Slater-Pauling :

Le moment magnétique varie régulièrement en fonction du nombre d'électrons de valence et de la structure cristalline dans le cas des alliages Heusler. Ce comportement est appelé " Slater-Pauling"[22, 23,24]. On l'estime sur la base du nombre moyen d'électrons de valence (N_V) par atome. En général, dans les alliages Full-Heusler demi-métalliques avec la formule chimique X_2YZ , la bande minoritaire est occupée par 12 électrons. Si Z_t représente le nombre total d'électrons de valence, et M_t le moment total par unité de volume (mesuré en magnéton de Bohr), alors Z_t est donné par la somme du nombre d'électrons majoritaires (n_\uparrow) et minoritaires (n_\downarrow), tandis que M_t est donné par leur différence.

$$Z_t = n_\uparrow + n_\downarrow ; \quad M_t = n_\uparrow - n_\downarrow \quad (I. 1)$$

$$\text{D'où, } M_t = Z_t - 2 n_\downarrow \quad (I. 2)$$

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

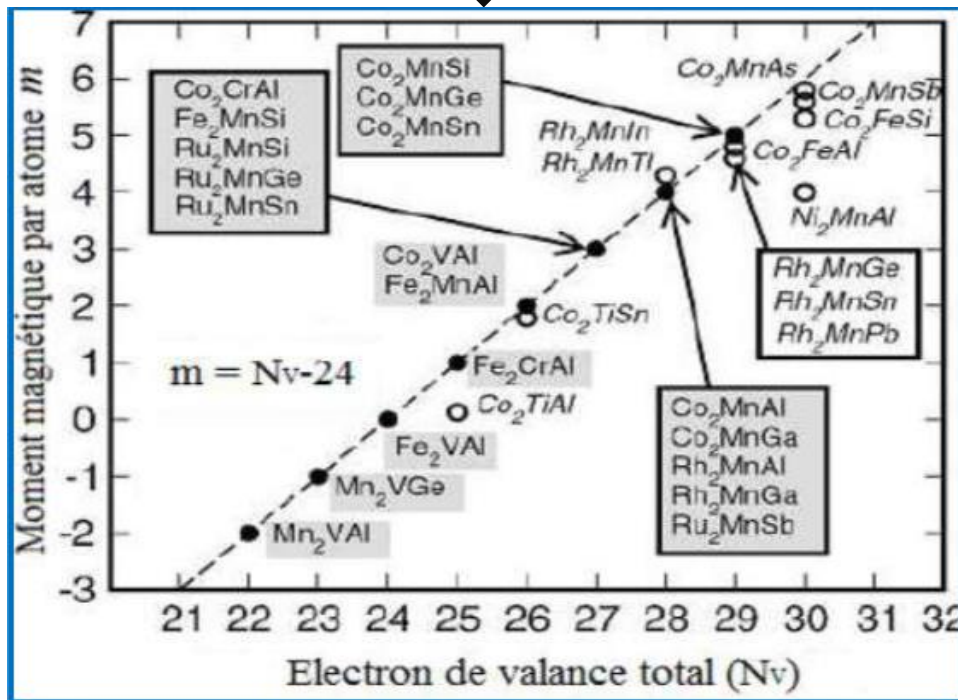


Fig. I. 6: Courbe de Slater-Pauling représentant le moment magnétique total en fonction du nombre d'électron de valence total (N_v) pour les alliages Full-Heusler [25].

Dans les alliages Heusler L21, la bande minoritaire contient 12 électrons de valence donc :

$n = 12$ et le moment magnétique total M_t est donné par :

$$M_t = Z_t - 24$$

Dans la figure I.6 le moment magnétique suit la règle de Slater et Pauling telle que illustrée par le graphe en pointillé pour les full-Heusler étudié par I. Galanakis et al [25].

Les alliages Full-Heusler symbolisés par des points noirs sur ce même graphe, obéissent à cette règle de Slater-Pauling. Nous remarquons aussi que le moment magnétique augmente de 1 lorsque le nombre d'électrons de valence augmente de 1 dans ces alliages, alors que les composés qui s'écartent légèrement de la ligne en pointillée ne suivent pas exactement cette règle.

I.5.2. Demi-métallicité des alliages d'Heusler :

Groot et ses collaborateurs ont introduit la notion de demi-métallicité dans leurs calculs de la structure de bandes des alliages demi-Heusler : $NiMnSb$ [3]. La densité d'états électronique de matériaux ferromagnétiques conventionnels est $(N(E_F))$, au niveau de Fermi pour les électrons de spin majoritaires (up : $N_{\uparrow}(E_F)$) et de spin minoritaires (down : $N_{\downarrow}(E_F)$). La polarisation P en spin, qui mesure l'asymétrie en spin : [26] :

$$P(E_F) = \frac{N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)}{N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)} \quad (I. 3)$$

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Les matériaux demi-métalliques présentent ainsi une propriété métallique pour une direction de spin (densité d'état non-nulle au niveau de Fermi) et une propriété semi-conductrice ou même isolante pour l'autre direction de spin et donc un taux de polarisation en spin de 100% [27] (Fig. I.7).

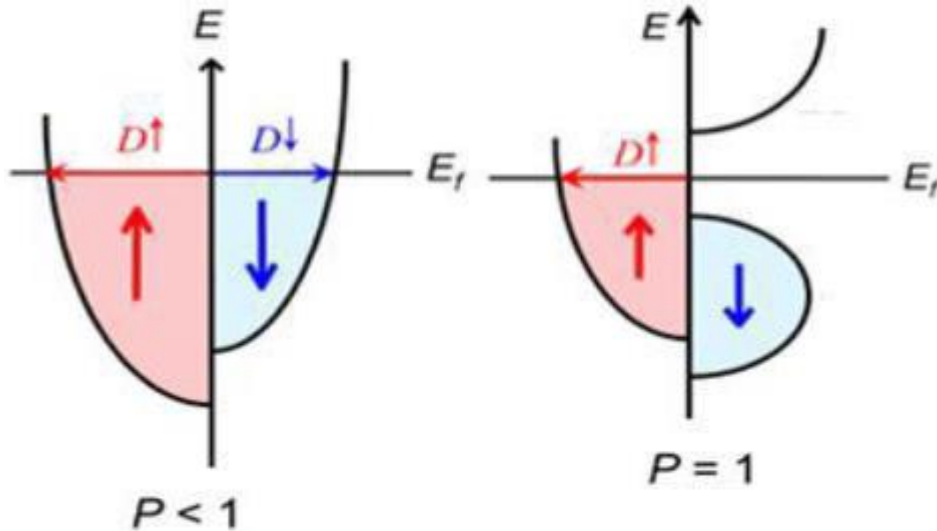


Fig I. 7: Structure de bandes pour un matériau (a) ferromagnétique conventionnel et (b) demi-métallique [28].

La classification citée ci-dessous donne les différents types de ferromagnétisme demi-métalliques [7]:

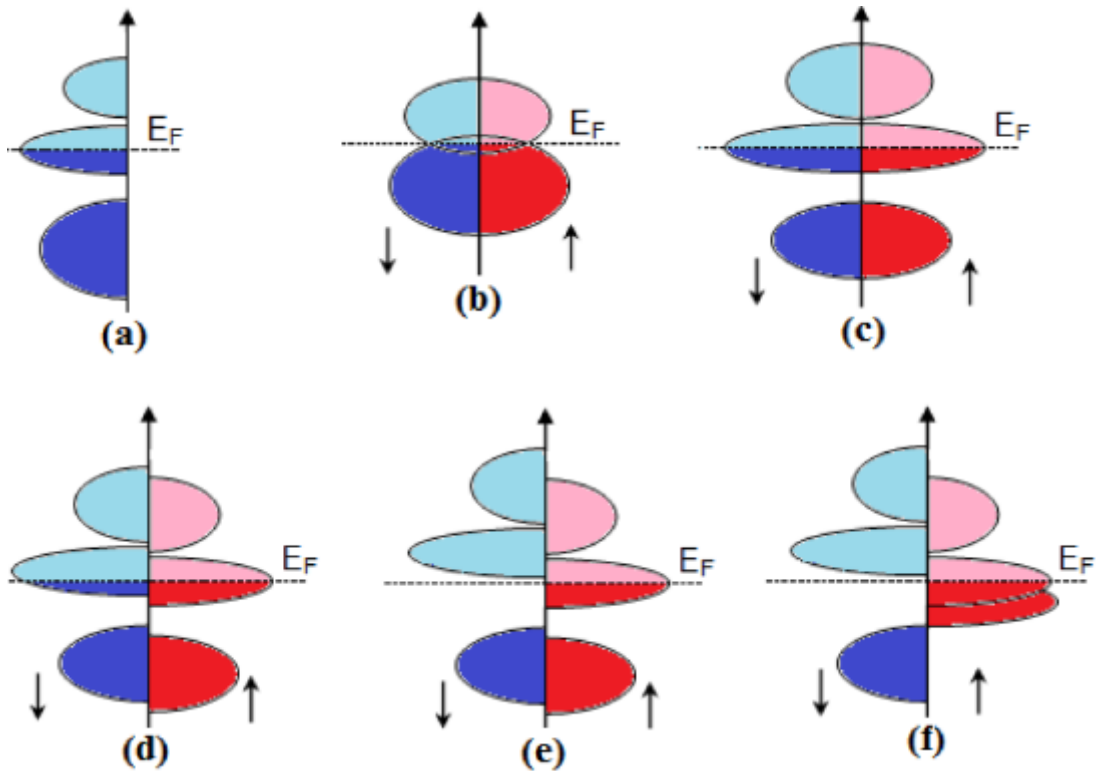


Fig I. 8: Illustration schématique de la densité des états (a) d'un métal, (b) demi-métal, (c) un métal (spin polarisé), (d) un ferromagnétique, (e) un ferromagnétique demi-métallique, et (f) un ferrimagnétique demi-métallique[7]

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Cette figure donne une représentation simplifiée de la densité d'états (DOS) de : (a) un métal avec une densité d'états au niveau de Fermi, (b) un demi-métal avec un petit chevauchement (1%), (c) un métal (spin polarisé) où les deux états sont identiques dans les deux directions de spin Up et Down et tous sont aussi occupés, (d) la DOS d'un composé ferromagnétique, dans lequel les états majoritaires et les états minoritaires sont décalés les uns par rapport aux autres, conduisant à une aimantation mesurable, (e) un demi-métal ferromagnétique (HMF) qui joue un rôle d'un métal pour une orientation de spin et comme un isolant pour l'autre orientation de spin, enfin (f) le cas d'un demi-métal ferrimagnétique[7].

La structure électronique joue un rôle important dans la détermination des propriétés magnétiques et de demi-métallicité des alliages Heusler, par conséquent, les calculs de structure de bande prennent une place importante. Après les premières synthèses des alliages Heusler à base de cobalt, dans les années 70, les premières indications de demi-métallicité sont rapportées sur les couches de Co_2MnAl et de Co_2MnSn par Kübler [29] et de Co_2MnSi , Co_2MnGe par Ishida [30].

Gercsi et ses collaborateurs [31] ont étudié les alliages à base de cobalt, de forme quaternaire tel que le $\text{Co}_2\text{FeSi}_{1-x}\text{Al}_x$ et ont montré que la largeur de la bande interdite (gap) de spin minoritaire diminue avec l'addition de l'Al. Xu et ses collaborateurs ont étudié la demi-métallicité de Co_2FeAl sous forme de massif et de couche mince, respectivement et ont montré que la demi-métallicité s'atténue avec la réduction de taille. Cette diminution est généralement associée au désordre chimique [32].

I.5.2.1. Les demi-métaux dans la spintronique :

Dans un demi-métal, d'après de Groot, seuls les électrons d'une orientation de spin donnée (« up » ou « down ») sont métalliques, tandis que les électrons de l'autre orientation de spin ont un comportement semi-conducteur. Autrement dit, les demi-métaux ont une polarisation en spin de 100% puisque la conduction n'est assurée que par des électrons de spin « up » ou des électrons de spin « down ».

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

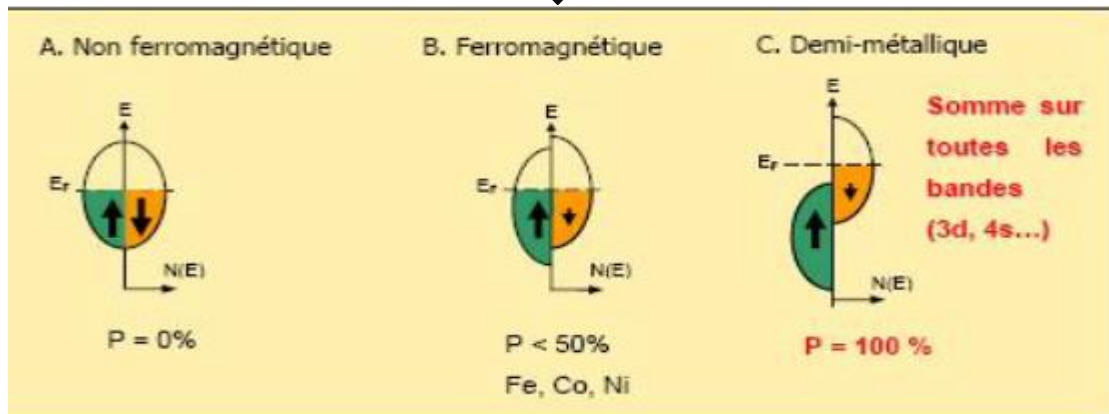


Fig I. 9: représentation schématique des densités d'états et polarisation en spin d'un métal non ferromagnétique (A), d'un matériau ferromagnétique (B) et d'un matériau demi-métallique(C).

I.6. la spintronique

L'électronique classique est basée sur le contrôle de courants de charge, électrons de charge négative et trous de charge positive. Les composants (amplificateurs, filtres, mémoires, microprocesseurs), sont réalisés avec des matériaux semi-conducteurs, majoritairement du silicium. Les phénomènes physiques à l'origine des fonctionnalités obtenues mettent en jeu des processus complexes d'injection et de recombinaison des porteurs (électrons et trous) dans le matériau semi-conducteur qui change localement de caractéristiques par dopage ou par la réalisation d'hétérostructures en multicouches. Or, d'après le théorème d'Ampère, les électrons sont des charges électriques en mouvement de rotation sur elles-mêmes, possèdent également un moment magnétique propre appelé moment de spin ou spin, quantifié selon deux valeurs opposées $+1/2$ (up, vers le haut) et $-1/2$ (down, vers le bas). Dans les métaux usuels (cuivre, aluminium, ...), ce moment de spin ne joue aucun rôle. Dans les matériaux magnétiques, par contre, le spin des électrons peut être utilisé en plus de la charge électrique comme facteur discriminant des porteurs électriques. [33].

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[34], a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60[35, 36].

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

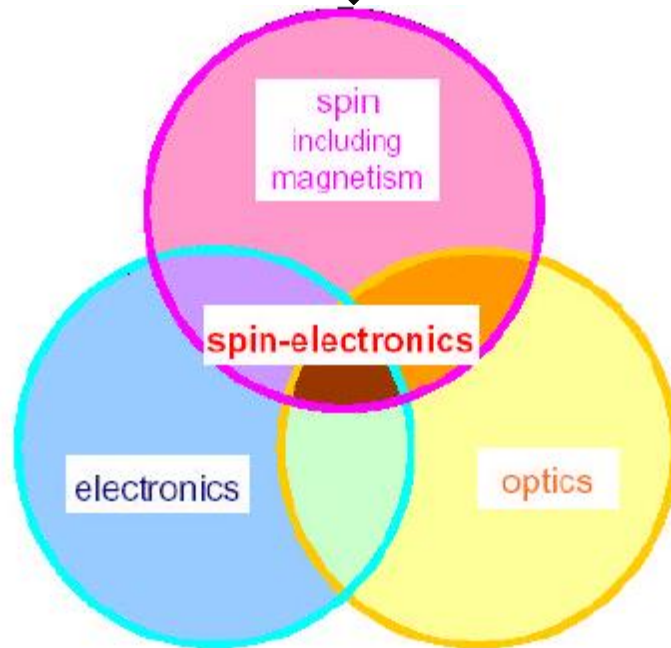


Fig. I. 10: Concept de la spintronique.

I.6.1.applications de la spintronique :

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 sont d'importantes applications de la spinotrope de nos jours.

I.6.1.1.Magnétorésistance Géante (GMR) :

Découverte en 1857 par William Thomson, la magnétorésistance correspond à la variation de la résistance électrique en présence d'un champ magnétique. A la fin des années 1980, applications relatives à la magnétorésistance, on mit au jour des détecteurs et capteurs.

L'effet GMR est un effet quantique qui est observé dans un empilement de type Ferro/Métal/Ferro[37].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.

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers



Fig. I. 11: les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction géante magnétique.

On assiste par effet de GMR à une différence de résistance électrique dans les deux électrodes. En effet, 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, et elle n'est faible que si leur aimantation est parallèle.

I-6.1.2. Magnétorésistance Tunnel (TMR) :

La magnétorésistance à effet tunnel (TMR) 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 [37], et dès de 1995, les travaux de Moodera et al sur des empilements $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{CoFe}$, lui ont fait regain d'intérêt. La TMR a une structure semblable à celle des vannes de spin mais, à la différence que la couche séparatrice est une fine couche de matériau isolant appelée barrière tunnel (par exemple en alumine d'épaisseur 1,5nm) et donc elle est observée 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 dernière ne doit pas excéder 1 à 2 nanomètre.



Fig. I. 12: les deux états, parallèle et antiparallèle, dans une jonction tunnel magnétique.

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Des travaux récents ont montré qu'en utilisant des matériaux Heusler comme des électrodes dans des MTJ (jonctions magnétiques tunnels) [38, 39, 40], permettent d'atteindre des valeurs élevées de TMR.

La découverte de la magnétorésistance géante (GMR) et de la magnétorésistance tunnel(TMR) a entraîné un bouleversement technologique majeur dans le domaine de la microinformatique. De nouvelles architectures de têtes de lecture de disque dur modernes basées sur ce principe ont été mises au point et 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 Acces 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 contrairement 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 [11].

I.7.Les métaux de transition

I.7.1.définition :

Tels que définis par l'I.U.P.A.C ; ce sont des éléments du tableau périodique dont l'atome possède une sous couche d partiellement remplie. Ils peuvent former un cation dont la sous-couche d est partiellement remplie. Ceci exclut la colonne 12(zinc, cadmium, mercure).

Ils sont situés au milieu du tableau périodique, c'est le bloc d, ils ont une densité et une température de fusion et de vaporisation élevées, sauf ceux du groupe 12 qui ont au contraire un point de fusion assez bas : le mercure(Hg) est liquide au-dessus de -38.8°C et le Copernicium (Cn) serait peut-être même gazeux à la température ambiante. Ces propriétés sont dues à la capacité des électrons de la sous-couche d à se délocaliser dans le réseau métallique .ces éléments ont des propriétés magnétiques comme le cobalt (Co), aussi une bonne conductivité thermique et électrique comme le Titanium (Ti) [42].ces deux derniers sont choisis dans ce mémoire.

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

s Elements										p Elements									
H																		He	
Li	Be	d Elements : transition										B	C	N	O	F	Ne		
Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Al	Si	P	S	Cl	Ar		
K	Ca	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Rb	Sr	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Cs	Ba	f Elements																	
Fr	Ra	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

44,956	47,867	50,942	51,996	54,938	55,845	58,933	58,693	63,546	65,39
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
88,906	91,224	92,906	95,94	98,906	101,07	102,91	106,42	107,87	112,41
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
138,91	178,49	180,95	183,84	186,21	190,23	192,22	195,08	196,97	200,59
La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
57	72	73	74	75	76	77	78	79	80

Fig. I. 13: métaux de transition dans le tableau périodique.[41]

I.8.L'aluminium et le Gallium

Le gallium (Ga) de numéro atomique 31, tout comme l'aluminium (Al) de numéro atomique 13, sont des éléments chimiques de la famille des métaux pauvres (bloc p de la table périodique).

L'aluminium est malléable, de couleur argentée, qui est remarquable pour sa résistance à l'oxydation et sa faible densité. Sa résistance à la corrosion et sa remarquable légèreté en ont fait un matériau très utilisé industriellement pur ou allié.

A l'état pur, le gallium est de couleur argentée, et est relativement cassant. Sa température de fusion est à 29,76 °C.

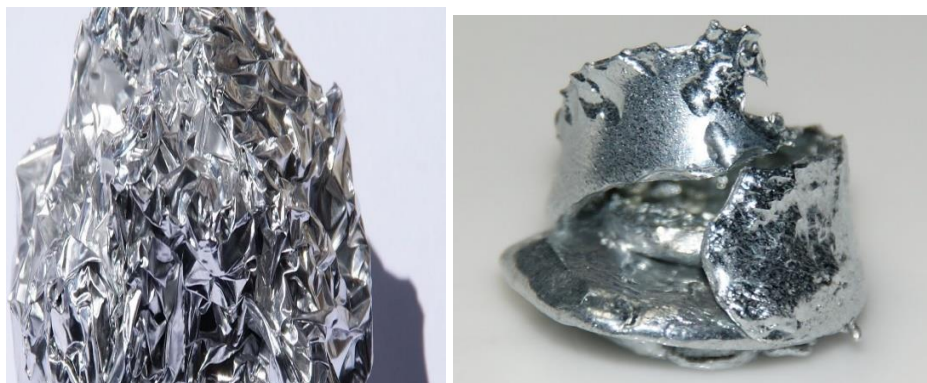


Fig. I. 14: Aluminium (à gauche). Gallium (à droite).

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

I.8.1. Propriétés générales :

Le tableau suivant résume des propriétés générales de l'aluminium et du Gallium :

Tableau. I. 3 : Propriétés générales de l'Aluminium et du Gallium.

Aluminium	Gallium
Etat ordinaire	Etat ordinaire
Solide	Solide
Masse molaire [g/mol]	Masse molaire [g/mol]
26,981	69,723
Masse volumique [g/cm ³]	Masse volumique [g/cm ³]
2,7	5,904
Température de fusion [°C]	Température de fusion [°C]
660,3	29,78
conductivité électrique 10 ⁶ .S.m ⁻¹	conductivité électrique 10 ⁶ .S.m ⁻¹
37,7	6,78

I.8.2. Structure cristallographique :

Le gallium cristallise en phase β sous la forme monoclinique dont les paramètres de mailles sont $a=2,766 \text{ \AA}$, $b=8,053 \text{ \AA}$, $c=3,332 \text{ \AA}$.

L'Aluminium cristallise dans la structure cubique à faces centrées avec paramètre de maille $a=4,05 \text{ \AA}$.

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

Références bibliographiques :

- [1] Resta, R., Macroscopic polarization in crystalline dielectrics: the geometric phase approach. *Review of Modern Physics*, 66(3). p. 899-915. (1994).
- [2] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, *Verh DPG* 5 (1903) 220.
- [3] R. A. de Groot and F. M. Mueller, "New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. (1983).
- [4] A. Hirohata, M. Kikuchi, N. Tezuka, K. Inomata, J. Claydon, Y. Xu, and G. Vanderlaan, "Heusler alloy/semiconductor hybrid structures," *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, vol. 10, no. 2, pp. 93–107, Apr. (2006).
- [5] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, *Angew Chem Int Ed* 46 (2007) 668.
- [6] S. Sakurada, N. Shutoh, *Appl Phys Lett* 86 (2005) 082105.
- [7] H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Mostaganem, Université ABDELHAMID IBN BADIS, Thèse de Doctorat (2015).
- [8] H. ZENASNI, « Etude théorique des propriétés magnétique électronique et structurales des alliages Heusler », Tlemcen, Université ABOUBAKR BELKAID, Thèse de Doctorat (2013).
- [9] S. Sakurada, N. Shutoh, *Appl Phys Lett* 86 (2005) 082105.
- [10] P. J. Webster, K. R. A. Ziebeck, *Landolt-Börnstein - group III condensed matter*, vol. 19C. Berlin: Springer; 19 (1988) 75-184.
- [11] D. BENTAIFOUR, « Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire NiCoMnGexSn_{1-x} », Mostaganem, Université ABDELHAMID IBN BADIS, Mémoire de Master (2017).
- [12] M. Puselj, Z. Ban, *Croat Chem Acta* 41 (1969) 79.
- [13] J. Drews, U. Eberz and H. Schuster, *J. Less-Common Met*, 116, pp. 271–278 (1986).
- [14] X. Dai, G. Liu, G.H. Fecher, C. Felser, Y. Li and H. Liu, *J. Appl. Phys.*, 105, pp. 07E901 (1–3) (2009).

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

- [15] I. Skovsen, L. Bjerg, M. Christensen, E. Nishibori, B. Balke, C. Felser, B. B. Iversen, Dalton Trans 39, 10154 (2010).
- [16] R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma, and K. Ishida, “Phase stability and magnetic properties of L21 phase in $\text{Co}_2\text{Mn}(\text{Al}_{1-x}\text{Six})$ Heusler alloys,” Scr. Mater., vol.58, no. 9, pp. 723–726, May (2008).
- [17] H. Kijima, T. Ishikawa, T. Marukame, H. Koyama, K. Matsuda, T. Uemura, and M. Yamamoto, “Epitaxial Growth of Full-Heusler Alloy Co_2MnSi Thin Films on MgO Buffered MgO Substrates,” IEEE Trans. Magn., vol. 42, no. 10, pp. 2688–2690, Oct. (2006).
- [18] B. HAMRI, « investigation théorique des propriétés structurales électroniques et magnétiques des alliages Heusler Ti_2VZ ($Z=\text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) », Sidi Belabbes, Université DJILLALI LIABES, thèse de Doctorat (2016).
- [19] K. BOUGUERRA « L’effet de la structure sur les propriétés électroniques et magnétiques dans les alliages d’Heusler », Msila, Université MOHAMED BOUDIAF, Mémoire de Master (2019)
- [20] I. Galanakis, P. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, “Electronic structure and Slater– Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles,” J. Phys. Appl. Phys, vol. 39, no. 5, pp. 765–775, Mar. (2006).
- [21] M. Hehn, F. Montaigne and A. Schuhl, " Magnéto-résistance géante et électronique de spin ", Techniques de l’Ingénieur l’expertise technique et scientifique de référence, 10- Nov-2002.
- [22]: I. Galanakis, P. Dederichs, and N. Papanikolaou, “Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys,” Phys. Rev. B, vol. 66, no. 17, Nov. (2002).
- [23]: J. Slater, “The Ferromagnetism of Nickel,” Phys. Rev., vol. 49, no. 7, pp. 537–545, Apr. (1936).
- [24]: L. Pauling, “The Nature of the Interatomic Forces in Metals,” Phys. Rev., vol. 54, no. 11, pp. 899–904, Dec. (1938).
- [25]: I. Galanakis, P. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, “Electronic structure and Slater– Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles,” J. Phys. Appl. Phys., vol. 39, no. 5, pp. 765–775, Mar.(2006).
- [26] M. Hehn, F. Montaigne, and A. Schuhl, “Magnéto-résistance géante et électronique de spin.” Techniques de l’Ingénieur l’expertise technique et scientifique de référence, 10Nov-(2002).
- [27] S. NOUI « Les alliages d’Heusler demi-métallique : étude théoriques des propriétés magnétiques et électroniques », Batna, Université HADJ LAKHDAR, Thèse de Doctorat (2019).

Chapitre I : Généralités sur les Heuslers

- [28] H. TUZCUOGLU, thèse de doctorat de l'université PARIS NORD - PARIS XIII, (2014).
- [29] J. Kübler, A. William, and C. Sommers, "Formation and coupling of magnetic moments in Heusler alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 28, no. 4, pp. 1745–1755, Aug. (1983).
- [30] S. Ishida, T. Masaki, S. Fujii, and S. Asano, "Theoretical search for half-metallic films of Co_2MnZ ($Z = \text{Si}, \text{Ge}$)," *Phys. B Condens. Matter*, vol. 245, no. 1, pp. 1–8, Jan. (1998).
- [31] Z. Gercsi and K. Hono, "Ab initio predictions for the effect of disorder and quaternary alloying on the half-metallic properties of selected Co_2Fe -based Heusler alloys," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 19, no. 32, p. 326216, Aug. (2007).
- [32] X. Xu, Y. Wang, D. Zhang, and Y. Jiang, "Electronic structures and the spin polarization of Heusler alloy Co_2FeAl surface," *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 263, p. 012016, Jan. (2011).
- [33] A.AKRICHE « Etude des propriétés physiques des HEUSLER de type X_2MnY ($\text{X} = \text{Co}, \text{Ni}$, $\text{Y} = \text{Sn}, \text{Al}, \text{Ge}$) par la méthode FP-LMTO », Oran, Université MOHAMED BOUDIAF, Thèse de Doctorat (2016)
- [34] N. F. Mott, *Prac Roy. Soc.* A153 (1936)699.
- [35] A. fert et I. A. Campbelle, *Phys. Rev. Lett.* 21 (1968) 1190, *J. physique* 32 (1978), C1 46, *J. phys.* F.6(1976)849.
- [36] B. Loegel , F. Gautier, *J. phys. Chem. Sol.*32(1971) 2723.
- [37] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, *Angew. Chem.* 2007, 119, 680; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 46 (2007), 668.
- [38] K. Inomata, S. Okamura, R. Goto, N. Yezuka, *Jpn J Appl Phys* 42 (2003) L419.
- [39] S. Kämmerer, A. Thomas, A. Hütten, G. Reiss, *Appl Phys Lett* 85 (2004) 79.
- [40] C. Herbot, E.A. Jorge, M. Jordan, *Appl Phys Lett* 94 (2009) 142504.
- [41]Eni Generalic. Tableau périodique des éléments. [En ligne]. <https://www.periodni.com/fr/v.html/> [Page consultée le : 18.03.2021].
- [42] M.ABANE, « Etude Des Propriétés Structurales Et Electroniques Des Semi-conducteurs Magnétiques Dilués $\text{Al}_{1-x}\text{TM}_x\text{N}$ (avec : $\text{TM} = \text{V}, \text{Fe}$), Et ($x = 0.125, 0.25$ et 0.5) » Tissemsilt, Université AL WANCHARISSI, Mémoire de Master (2018).



CHAPITRE II :
RÉSULTATS ET
DISCUSSION

Chapitre II : Résultats et discussion

Chapitre II : Résultats et discussion

La théorie et l'expérimentation sont deux approches complémentaires dans la recherche scientifique. La résolution analytique des modèles physiques réalistes mais très complexes pour décrire finement les comportements expérimentaux demeure un inconvénient de taille. Cependant l'évolution rapide récemment des ordinateurs et des algorithmes et plus précisément de l'expérimentation numérique a permis en partie de pallier cette difficulté, malgré que le temps de calculs peuvent demeurer longs dans certains cas.[1]

Dans ce chapitre, nous discutons et présentons les résultats de nos calculs tels que les propriétés structurales, électroniques et magnétique des composés Ti_2Co (Al,Ga) en se basant sur DFT. Les calculs ont été réalisés par le code WIEN2K en utilisant la méthode ab-initio dite des ondes planes linéairement augmentées (FP-LAPW). Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par l'approximation GGA [2, 3 ,4].

II.1.Détail de calculs :

Dans ce travail, nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques, magnétiques des alliages Ti_2Co (Al, Ga) en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées avec Full potentiel (FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k, dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en traitant l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation du gradient généralisé (GGA).

Dans la méthode (FP-LAPW), la maille élémentaire est devisée en deux régions :

1. les sphères qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome (Muffin-tin sphères) de rayon RMT.

2. La région interstitielle (la région qui reste).

Dans cette prédiction, nous avons utilisé les rayons Muffin-Tin (MT) pour les atomes Ti : 2.26, Co :2.38 Al :2.14 dans la phase Hg_2CuTi et 2.20 pour la phase Cu_2MnAl alors que pour Ga : 2.26 pour la phase Hg_2CuTi et 2.32 pour la phase Cu_2MnAl .

La configuration électronique des atomes est :

Ti: [Ar] $3d^2 4s^2$,

Chapitre II : Résultats et discussion

Co: [Ar] 3d⁷ 4s²,

Al: [Ne] 3s² 3p¹,

Ga: [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p¹.

II.2. La structure cristalline des alliages Heusler :

Les alliages Heusler Ti₂Co (Al, Ga) ont la formule X₂YZ, 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. En général, les alliages Heusler cristallisent dans des structures cubiques du réseau de Bravais cubique à faces centrées. Selon les positions atomiques on peut distinguer deux types structuraux différents :

- Hg₂CuTi : les atomes X occupent les sites A (0, 0, 0) et B (1/4, 1/4, 1/4), l'atome Y occupe le site C (1/2, 1/2, 1/2), et l'atome Z le site D (3/4, 3/4, 3/4).

- Cu₂MnAl : les atomes X occupent les sites A (0, 0, 0) et C (1/2, 1/2, 1/2), l'atome Y occupe le site B (1/4, 1/4, 1/4), et l'atome Z le site D (3/4, 3/4, 3/4).

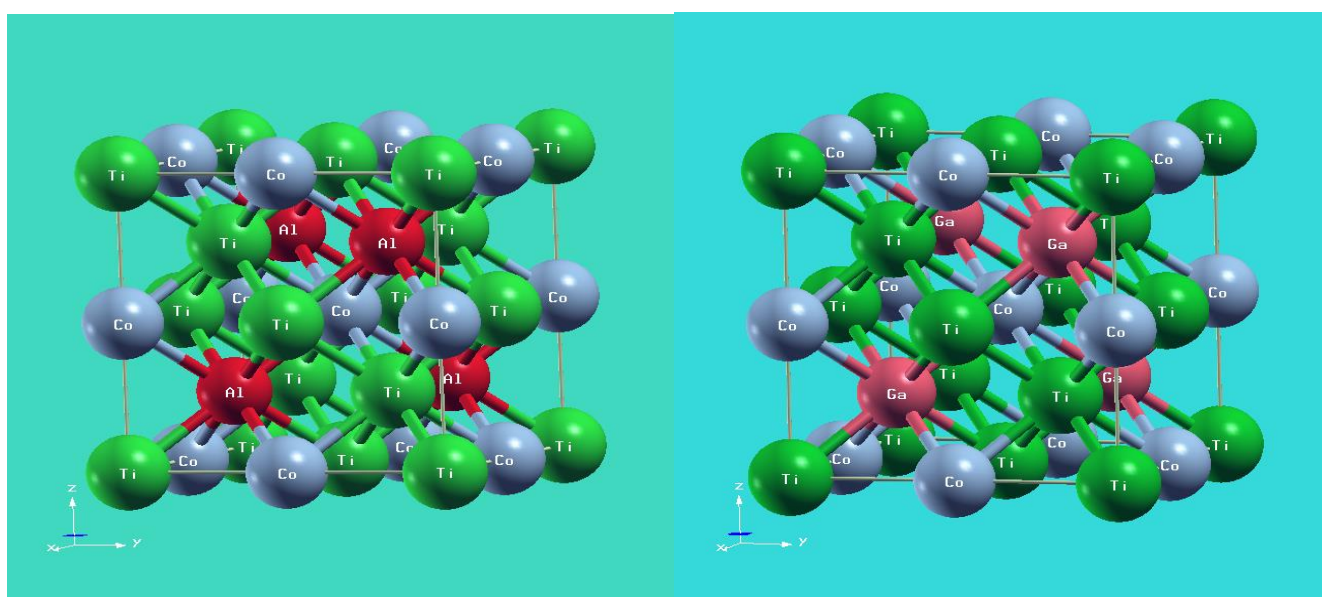


Fig. II.1. a : Structure cristalline de Ti₂CoAl (à gauche) et Ti₂CoGa (à droite) dans la phase Hg₂CuTi.

Chapitre II : Résultats et discussion

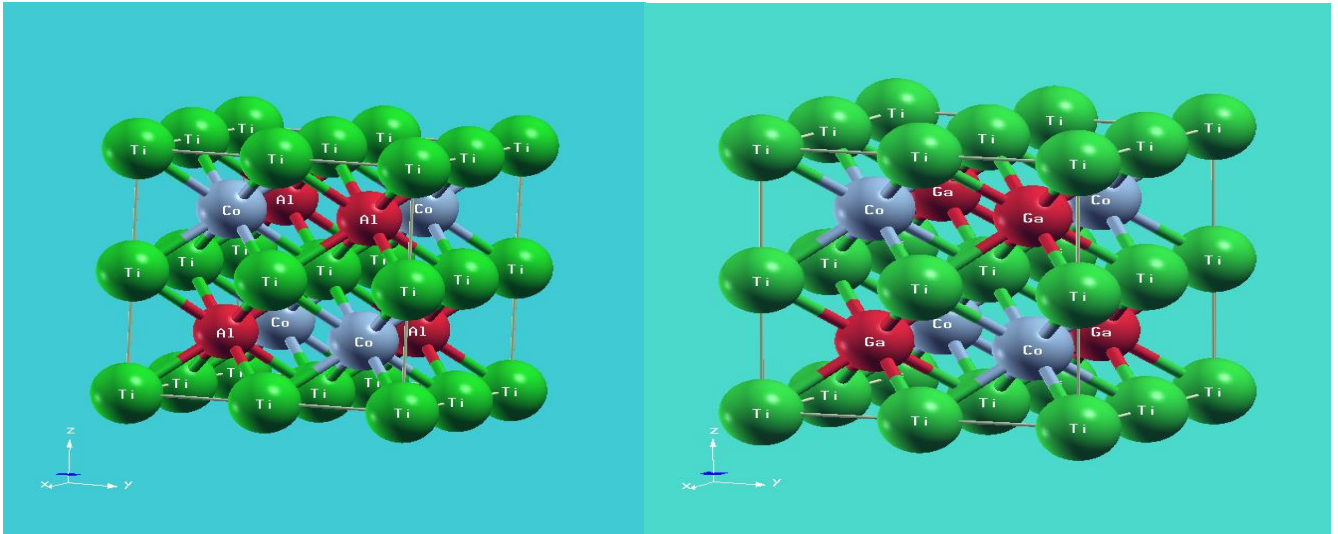


Fig. II.1. b : Structure cristalline de Ti₂CoAl (à gauche) et Ti₂CoGa (à droite) dans la phase Cu₂MnAl.

II.3. Les Propriétés Structurales :

Dans cette partie, nous présentons nos résultats en rapport avec les propriétés structurales qui constituent un pas important afin de comprendre les autres propriétés de l'alliage du point de vue microscopique.

II.3.1. Etat d'équilibre et la stabilité structurale :

L'étape fondamentale dans tout le calcul c'est la détermination des structures d'équilibre ; le volume d'équilibre V_0 (et donc la constante du réseau a_0), le module de compressibilité (B_0) ainsi que la première dérivée du module de compressibilité (B_0') et ceci afin d'entamer le calcul à partir d'une structure correcte, et de pouvoir comparer aux paramètres issus de l'expérience ou d'une autre étude théorique.

Les données structurales à l'équilibre sont obtenues par ajustement de l'énergie totale en fonction du volume (à la température $T=0K$) à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [5] donnée par :

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

Où B et B' sont respectivement le module de compressibilité à l'équilibre et sa dérivée par rapport à la pression, et V_0 étant le volume à l'équilibre de la maille élémentaire, le paramètre du réseau « a » correspondant à l'état fondamental est déduit à partir du minimum de la courbe E_{tot} .

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

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{II.2}).$$

B' : La dérivée du module de compressibilité par rapport à la pression :

Chapitre II : Résultats et discussion

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (\text{II.3}).$$

On a examiné les composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa en étudiant l'état d'équilibre avec l'analyse de la variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille, et ce afin de déterminer la phase structurale la plus stable parmi les deux types structuraux Hg_2CuTi et Cu_2MnAl avec polarisation de spin.

Les figures ci-dessous présentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume calculée par l'approximation GGA dans les deux phases structurales (avec spin).

Pour bien mettre en évidence l'énergie la plus basse, nous avons représenté l'optimisation des deux composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa dans les deux phases sur une même représentation graphique.

La figures(II.2) montre que :

1-La phase Cu_2MnAl est la plus stable pour le matériau Ti_2CoAl par rapport à la phase Hg_2CuTi (Fig.II.2.a). La phase stable présente toujours l'énergie totale la plus basse.

2- La phase Cu_2MnAl est plus stable pour le composé Ti_2CoGa que la phase Hg_2CuTi (Fig.II.2.b).le changement de l'atome Al par l'atome Ga dans la composition de l'alliage Heusler n'a pas affecté la stabilité structurale.

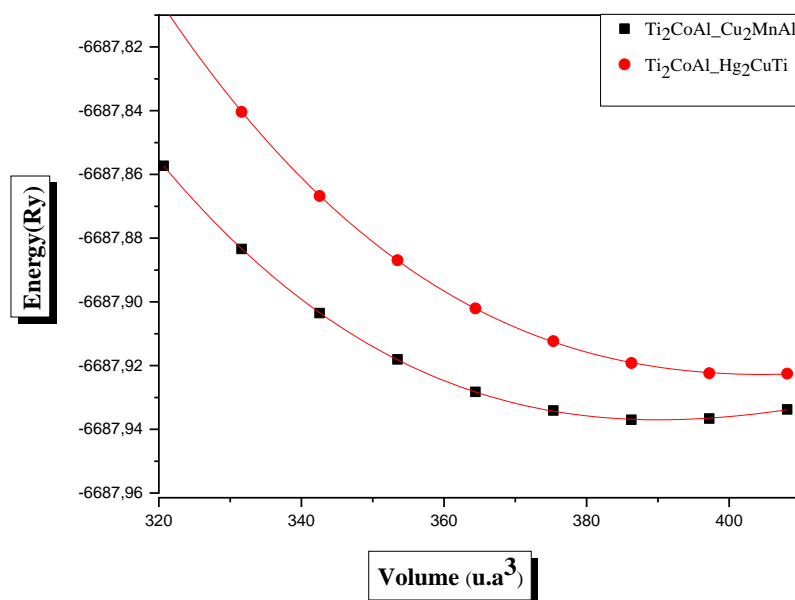


Fig.II.2.a : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de Ti_2CoAl dans les deux phases structurales Cu_2MnAl et Hg_2CuTi .

Chapitre II : Résultats et discussion

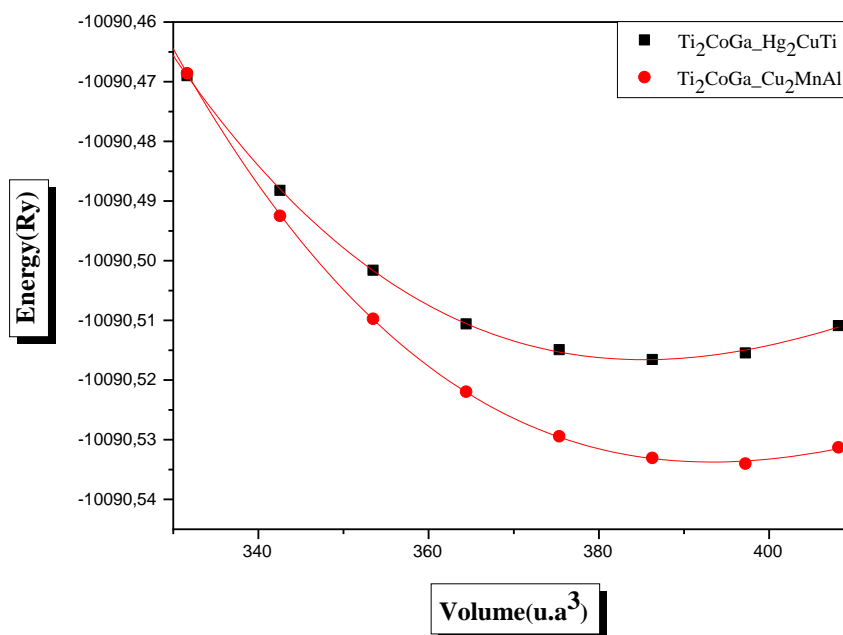


Fig.II.2.b : La variation de l'énergie totale en fonction du volume de Ti₂CoAl dans les deux phases structurales Cu₂MnAl et Hg₂CuTi.

Après l'ajustement des données par l'équation de Murnaghan nous avons déterminé les différentes valeurs des paramètres structuraux à l'état d'équilibre comme la constante de réseau (a) en (Å), le module de rigidité (B_0) en (GPa) et sa première dérivée par rapport à la pression (B'_0) pour les deux phases structurales Cu₂MnAl et Hg₂CuTi comme l'illustrent les résultats d'optimisation de la structure (cfc) de l'alliage Ti₂Co(Al, Ga).

Tableau II.1. : Le paramètre du réseau a (Å), le module de compressibilité B_0 et sa première dérivée par rapport à la pression B'_0 pour les deux phases structurales Cu₂MnAl et Hg₂CuTi.

Composé	a (Å)	B_0 (GPa)	B'_0
Ti ₂ CoAl_Hg ₂ CuTi	6.1390	138.5501	3.7414
	6.14 [6]	134.134[6]	3.929[6]
Ti ₂ CoAl_Cu ₂ MnAl	6.2073	133.5181	4.3283
Ti ₂ CoGa_Hg ₂ CuTi	6.1144	135.8456	5.1829
	6.11 [7]	140.369[7]	4.525[7]
Ti ₂ CoGa_Cu ₂ MnAl	6.1747	162.7960	3.6476

Remarquons que les paramètres trouvés dans nos calculs sont concordants avec d'autres résultats expérimentaux.

Chapitre II : Résultats et discussion

Le module de rigidité volumique (compressibilité) est une mesure de l'énergie requise pour produire une déformation donnée au sein du solide. Nos résultats montrent que le module de compressibilité est plus grand (et donc Ti_2CoAl est plus dur) dans la phase Hg_2CuTi par rapport au Ti_2CoGa , alors que Ti_2CoGa est plus dur dans la phase Cu_2MnAl par rapport à Ti_2CoAl .

II.4. Propriétés électroniques :

L'étude des propriétés électroniques du Ti_2Co (Al, Ga) permet d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau. Les propriétés électroniques du solide (structure de bande, densité d'état) dépendent essentiellement de la répartition des électrons dans les bandes de valence et de conduction, ainsi que de la valeur du gap. Ces derniers sont calculés pour l'alliage Heusler Ti_2Co (Al, Ga) à leur état d'équilibre avec le paramètre de maille optimisé dans les phases Hg_2CuTi et Cu_2MnAl .

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 et la densité d'états [8].

II.4.1. Densité d'états :

La densité d'états (DOS) est une grandeur physique importante pour la compréhension des propriétés physiques d'un matériau. La plupart des propriétés de transport sont déterminées sur la base de la connaissance de la densité d'états. Elle permet aussi de connaître la nature des liaisons chimiques dans un matériau (en calculant le taux d'occupation de chaque état atomique) et par conséquent, le transfert de charge entre les atomes.[9]

La densité d'états désigne les sites qui sont plus riches ou pauvres en électron, elle se retrouve majoritairement sur les atomes les plus électro-négatifs. La compréhension de la densité électronique permet de mieux trouver les sites électrophiles et nucléophiles dans une molécule.[8]

Les densités d'états totales et les densités d'états partielles des composés Ti_2Co (Al, Ga) sont calculées et tracées dans les figures II.3 (a, b, c et d), en tenant compte du calcul spin-polarisé pour les deux directions de spin minoritaires et majoritaires dans les deux phases structurales.

II.4.1.a. Les alliages Ti_2CoAl :

Remarquons au début, la faible contribution des atomes Al par leurs orbitales s dans la densité d'état totale comme c'est montré dans la fenêtre d'énergie [-8eV, -5eV] (Figure II.3.a).

Il est clair, que les densités d'états des électrons majoritaires (spin-up) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi avec la prédominance de l'atome Ti (1) et une contribution faible des atomes Ti (2) et Co, ce qui explique le caractère métallique de l'alliage dans le spin-up dans les deux phases Hg_2CuTi (Figure II.3.a) Cu_2MnAl (Figure II.3.b).

Chapitre II : Résultats et discussion

Par contre dans les densités d'états des électrons minoritaires (spin-down) : on note une nette bande interdite au niveau de Fermi ce qui montre le caractère semi-conducteur du composé dans la phase Hg₂CuTi, mais avec une intersection métallique et contribution de l'atome Al au niveau de Fermi dans la phase Cu₂MnAl.

L'alliage Ti₂CoAl possède le caractère métallique dans la direction de spin-up et semi-conducteur dans la direction de spin-down, dans la phase Hg₂CuTi. Ceci lui confère la caractéristique demi-métallique.

Dans la phase Cu₂MnAl on remarque bien le caractère métallique de l'alliage.

II.4.1.b. les alliages Ti₂CoGa :

La région énergétique [-9eV,-6eV] relève principalement de la contribution d'électrons d'atomes de Ga dans la densité d'état totale (Figure II.3.b).

On note une intersection métallique au niveau de Fermi des densités d'états des électrons majoritaires (spin-up) avec contribution de l'atome Ti (1) dans la phase Hg₂CuTi (Figure II.3.c) et prédominance de l'atome Ga dans la phase Cu₂MnAl (Figure II.3.d). Ceci est un signe du caractère métallique du composé dans le spin-up dans les deux types structuraux.

On note un Gap au niveau de Fermi à l'état de spin minoritaire ce qui montre le caractère semi-conducteur de l'alliage Heusler Ti₂CoGa dans la phase Hg₂CuTi, par contre il y a une intersection métallique avec contribution de l'atome Ga au niveau de Fermi dans la phase Cu₂MnAl.

L'existence du caractère métallique dans la direction de spin-up et le caractère semi-conducteur dans la direction spin-down confirme la caractéristique demi-métallique de l'alliage Ti₂CoGa dans la phase Hg₂CuTi. Dans la phase Cu₂MnAl il est métallique.

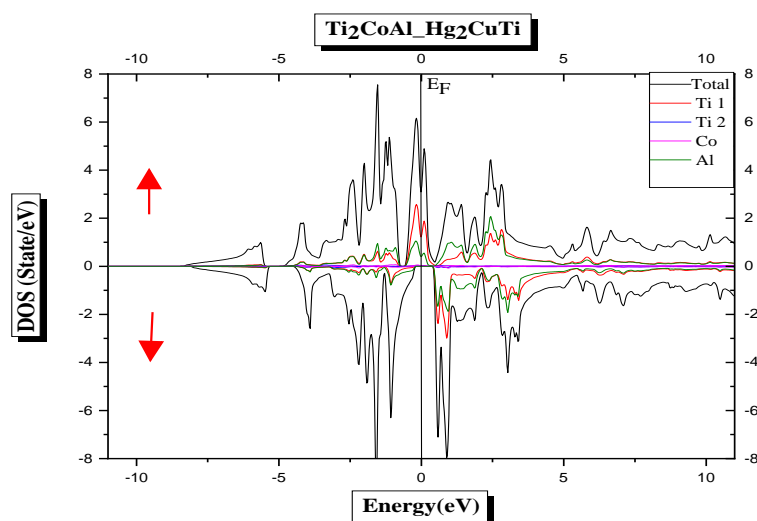


Fig.II.3.a : Les densités d'états, totaux et partiels du composé Ti₂CoAl Hg₂CuTi.

Chapitre II : Résultats et discussion

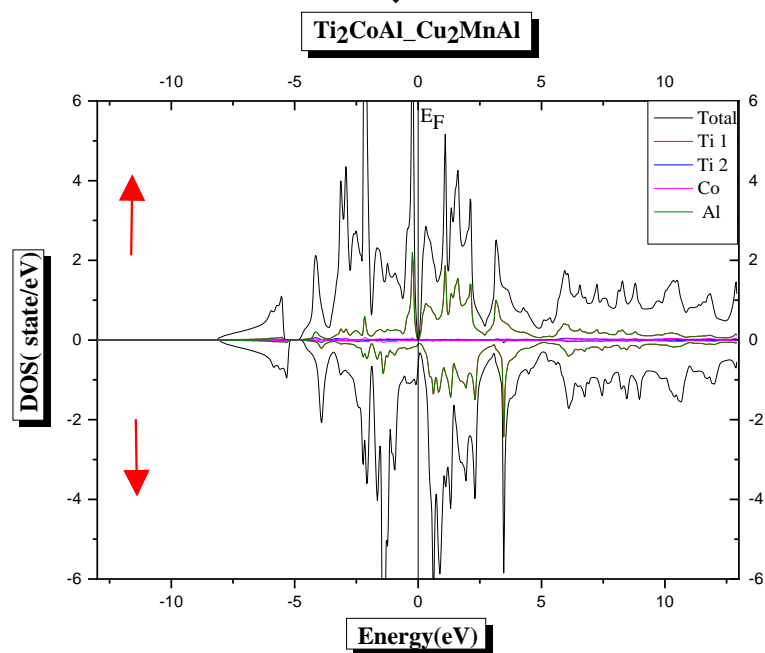


Fig.II.3.b : Les densités d'états, totaux et partiels du composé $\text{Ti}_2\text{CoAl}_2\text{Cu}_2\text{MnAl}$.

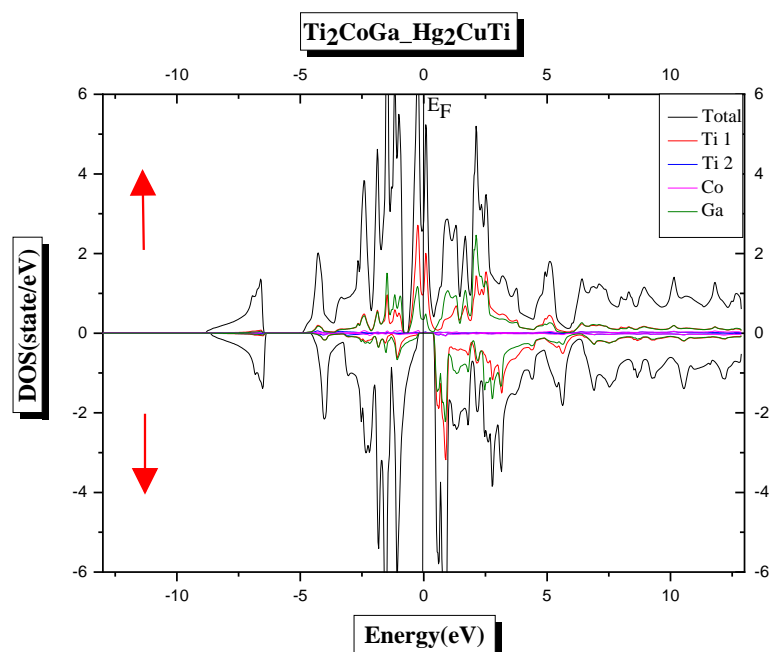


Fig.II.3.c : Les densités d'état, total et partiel du composé $\text{Ti}_2\text{CoGa}_2\text{Hg}_2\text{CuTi}$.

Chapitre II : Résultats et discussion

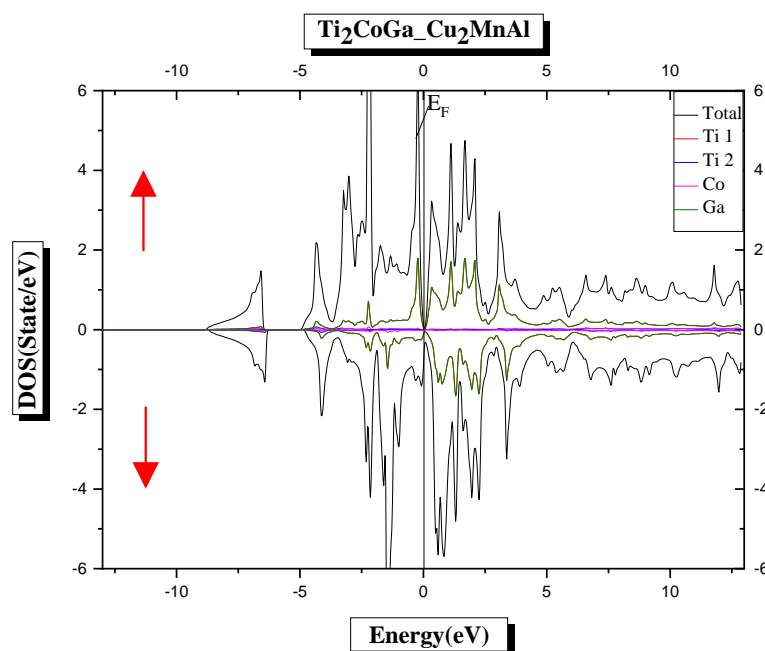


Fig.II.3.d : Les densités d'états, totaux et partiels du composé $\text{Ti}_2\text{CoGa}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnAl}$.

II.4.2. La structure de bande :

La théorie des bandes est une modélisation quantique en physique des solides qui détermine les valeurs d'énergie possibles que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. Ces électrons n'ont 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.[8]

Le niveau de Fermi qui est pris comme origine des énergies constitue la « ligne de séparation », au-dessus de laquelle les niveaux d'énergie tendent à être vides et en dessous de laquelle les niveaux d'énergie tendent à être remplis. Il permet de déterminer les propriétés de conduction d'un matériau.

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

Les structures de bandes des alliages Heusler Ti_2Co (Al, Ga) sont illustrées dans les figures II.4. (a, b, c, d, e, f, g, h), les calculs spin-polarisés sont effectués en utilisant le concept de spin-up et de spin-down des électrons séparément, tout au long des points et les directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin associée à l'état fondamental.

Chapitre II : Résultats et discussion

II.4.2.a. Alliage Ti₂CoAl :

Dans la phase structurale Hg₂CuTi, nous observons, dans la direction de spins majoritaires (up) un débordement de la bande de valence du niveau de Fermi, ce qui indique le comportement métallique (Fig. II.4.a), tandis que dans la direction de spin minoritaire (down) on note, (Fig.II.4.b), un caractère semi-conducteur avec un Gap indirect dans les directions (Γ -W). ceci indique le caractère demi-métallique de Ti₂CoAl_Hg₂CuTi.

Dans la phase Cu₂MnAl, phase de stabilité structurale, les structures de bandes de spins majoritaires (spin-up) et de spins minoritaires (spin-down) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi (Fig.II.4(c, d)) ce qui confirme le caractère métallique de Ti₂CoAl_Cu₂MnAl.

II.4.2.b. Alliage Ti₂CoGa :

Il est remarqué dans la phase Hg₂CuTi que les structures de bandes pour la direction des spins majoritaires (up) montrent des comportements métalliques à cause de la présence des intersections des états au niveau de Fermi E_F (Fig.II.4.e), tandis que dans la direction de spin minoritaire (down) .on trouve un gap indirect (Fig.II.4.f) autour du niveau de Fermi entre les directions (Γ -X) ce qui confirme le caractère demi-métallique de Ti₂CoGa_Hg₂CuTi

Dans la phase Cu₂MnAl, phase de stabilité structurale, le caractère métallique du composé Ti₂CoGa est confirmé par le chevauchement au niveau de Fermi du maximum de la bande de conduction et le minimum de la bande de valence (Fig.II.4 (g, h)) dans les directions de spins majoritaires (up) et minoritaires (down). Ce qui confirme le caractère métallique de Ti₂CoGa_Cu₂MnAl.

Les données de cette section (structure de bandes) viennent renforcer les résultats trouvés dans la section « densité d'états » notamment :

1. Caractère demi-métallique du composé Full-Heusler Ti₂Co (Al, Ga) dans la phase Hg₂CuTi.
2. caractère métallique du composé Full-Heusler Ti₂Co (Al, Ga) dans la phase Cu₂MnAl.

Chapitre II : Résultats et discussion

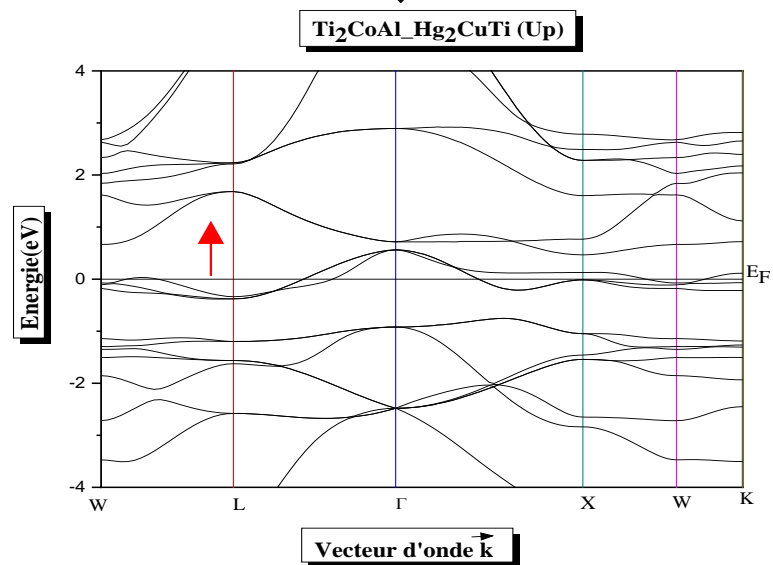


Fig.II.4.a : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoAl Hg₂CuTi (Up).

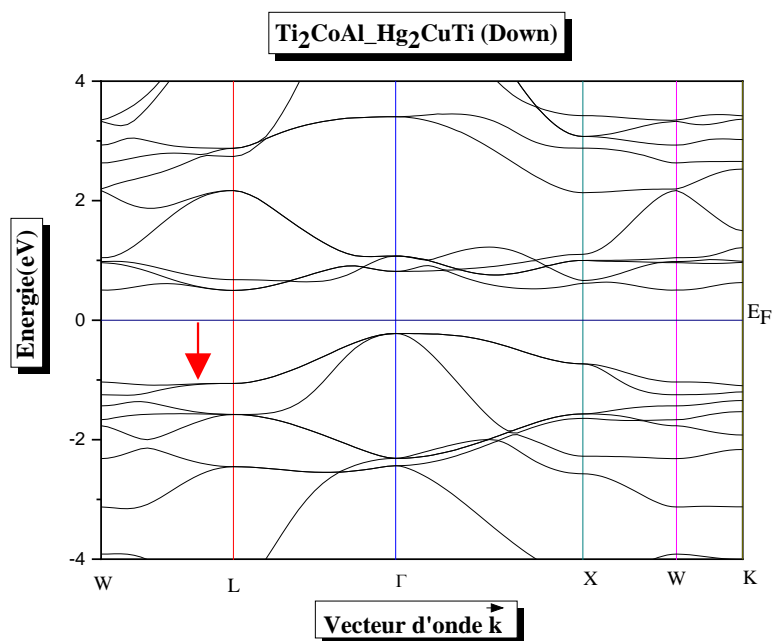


Fig.II.4.b : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoAl Hg₂CuTi (Down).

Chapitre II : Résultats et discussion

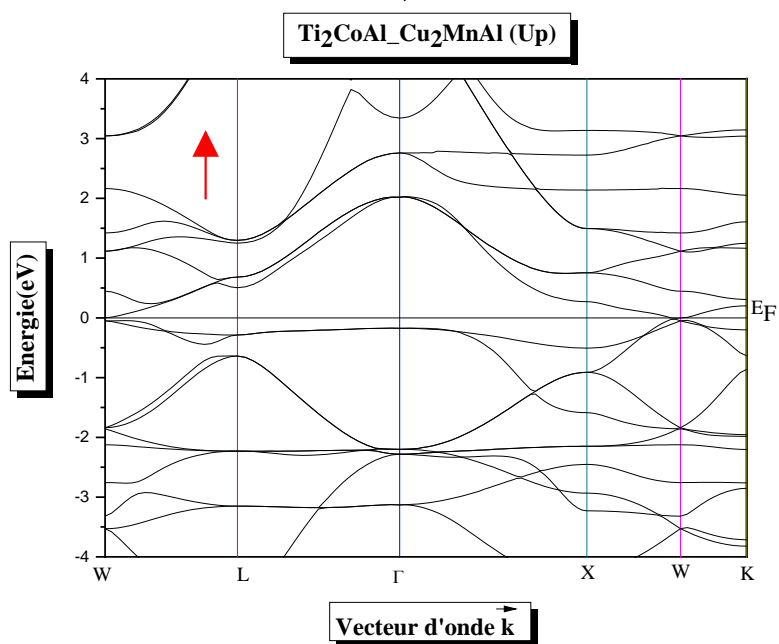


Fig.II.4.c : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoAl_Cu₂MnAl (Up).

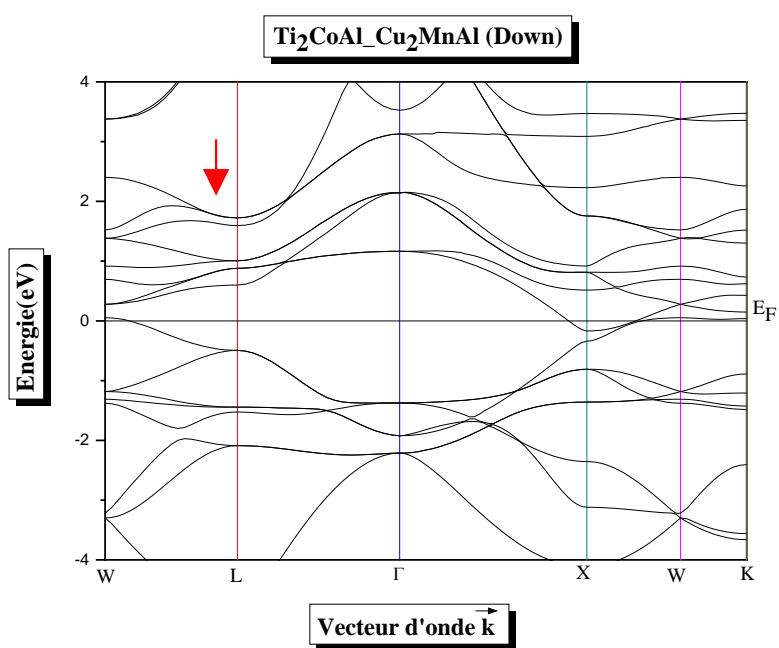


Fig.II.4.d : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoAl_Cu₂MnAl (Down).

Chapitre II : Résultats et discussion

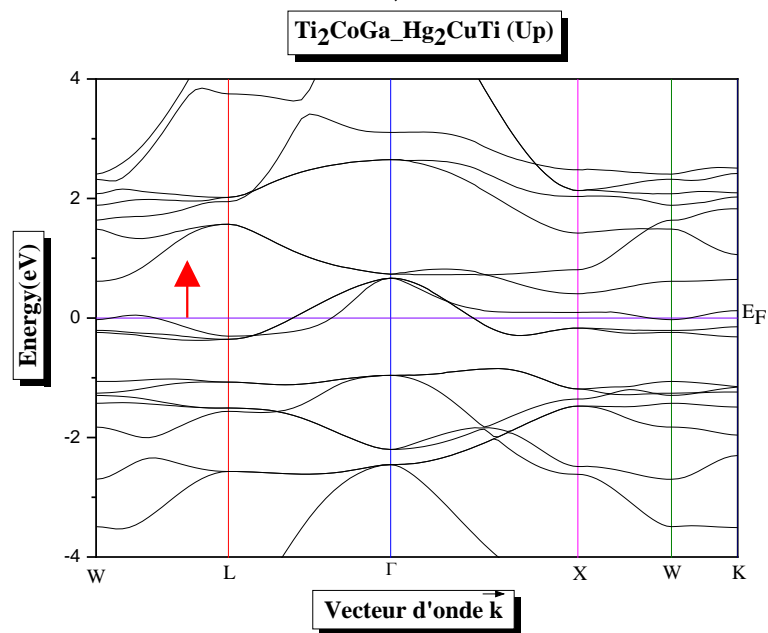


Fig.II.4.e : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoGa_Hg₂CuTi (Up).

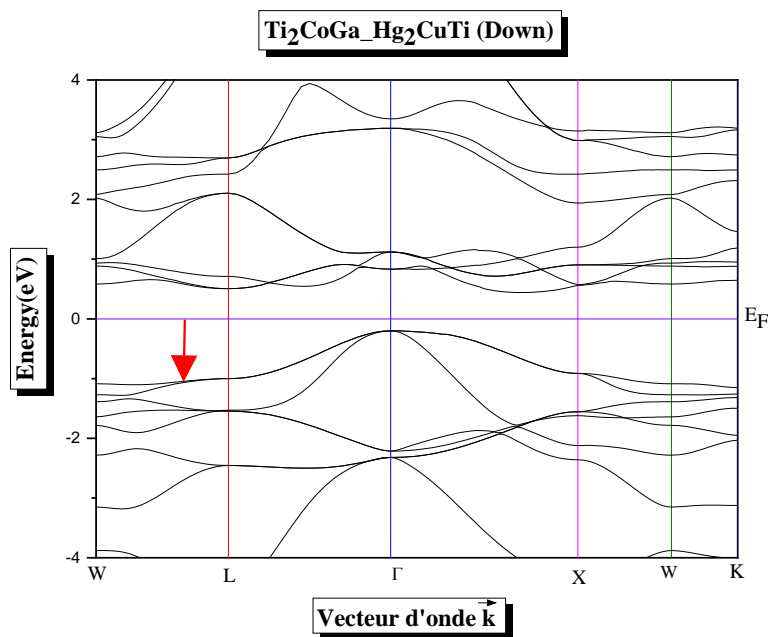


Fig.II.4.f : La structure de bande de l'alliage Ti₂CoGa_Hg₂CuTi (Down).

Chapitre II : Résultats et discussion

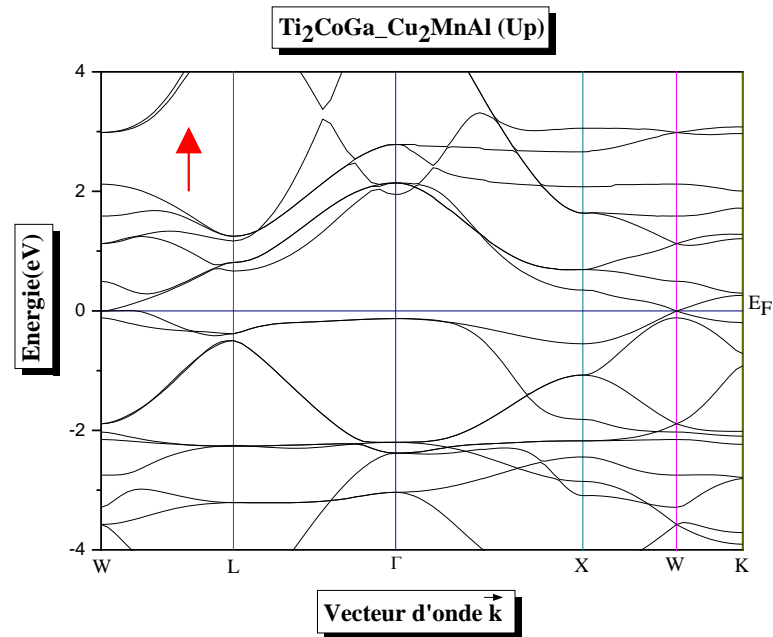


Fig.II.4.g : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa_Cu}_2\text{MnAl}$ (Up).

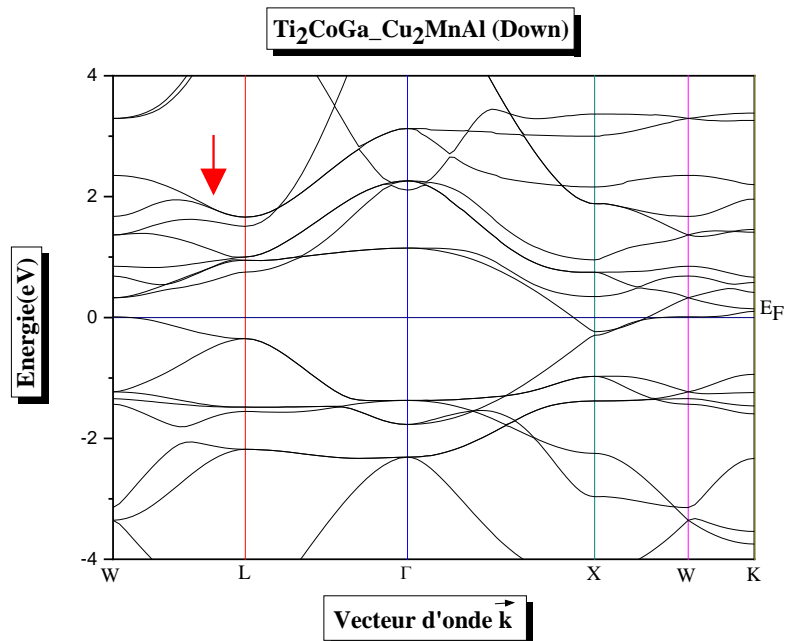


Fig.II.4.h : La structure de bande de l'alliage $\text{Ti}_2\text{CoGa_Cu}_2\text{MnAl}$ (Down).

II.5. Propriétés magnétiques :

Il est impératif de connaître le moment magnétique lors de l'étude des propriétés magnétiques d'un matériau, car il nous informe sur le taux de champ magnétique que le matériau possède ou les éléments qui le constituent, pour cela il est important d'étudier le comportement des moments magnétiques des spins dans les composés.[10]

Chapitre II : Résultats et discussion

Les tableaux II.2 (a, b) suivants regroupent les résultats obtenus concernant le calcul du moment magnétique total et partiels calculés avec spin polarisé dans les sphères muffin-tin et dans les sites interstitiels en (μB) et à l'équilibre pour les composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa dans les deux phases Hg_2CuTi et Cu_2MnAl :

Le moment magnétique total dans les deux composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa calculé par maille élémentaire aux paramètres d'équilibre est entier et égal à 2 dans la phase Hg_2CuTi . Sachant qu'une valeur entière du moment magnétique traduit le caractère demi-métallique de ces composés.

Dans la phase Cu_2MnAl le moment magnétique total n'est pas entier, les deux composés y sont métalliques.

Le moment magnétique total dans l'ensemble de ces composés est dû principalement à la participation de l'atome Ti (1) et Ti (2), alors que la contribution des atomes Al et Ga est faible dans les deux phases.

Tableau II.2.a : Le moment magnétique total M_{Total} (μB), avec les moments magnétiques ; interstitiel et partiels des atomes du composé Ti_2CoAl .

Composé	$M_{\text{Ti1}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Ti2}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Co}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Al}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{intrstiel}}$	M_{Total}
$\text{Ti}_2\text{CoAl_Hg}_2\text{CuTi}$	1.08180	0.59692	-0.22980	0.00085	0.55030	2.00008
	1.076[6]	0.580[6]	-0.196[6]	0.002[6]		2[6]
$\text{Ti}_2\text{CoAl_Cu}_2\text{MnAl}$	0.20092	0.20086	1.49378	0.03909	0.06916	2.00381

Tab.II.2.b. Le moment magnétique total M_{Total} (μB), avec les moments magnétiques interstitiels et partiels des atomes du composé Ti_2CoGa .


Tableau II.2. b : Le moment magnétique total M_{Total} (μB), avec les moments magnétiques interstitiels et partiels des atomes du composé Ti_2CoGa .

Composé	$M_{\text{Ti1}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Ti2}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Co}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Ga}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{intrstiel}}$	M_{Total}
$\text{Ti}_2\text{CoGa_Hg}_2\text{CuTi}$	1.07523	0.69423	-0.33865	-0.01273	0.58211	2.00019
	1.057[7]	0.639[7]	-0.201[7]	-0.007[7]		2[7]
$\text{Ti}_2\text{CoGa_Cu}_2\text{MnAl}$	0.18493	0.18473	1.50452	0.04822	0.07627	1.99867

Chapitre II : Résultats et discussion

Références bibliographiques :

- [1] K. BOUGERRA, « L'effet de la structure sur les propriétés électroniques et magnétiques dans les alliages d'Heusler », Msila, Université MOHAMED BOUDIAF, Mémoire de Master (2019).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, *Phy Rev* 140, A1133 (1965).
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phy Rev Lett* 77, 3865 (1996).
- [4] A. D. Becke and E. R. Johnson, *J. Chem. Phys.* 124, 221101 (2006).
- [5] F. D. Murnaghan, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 30, 244 (1944).
- [6] Bayar, E., Kervan, N.: *Selc-uk Kervan and 2945–2948. J. Magn. Magn. Mater.*, 323 (2011).
- [7] N. Kervann, *Selc-uk Kervan and 245-648. j. Magn. Mater.*, 324 (2012).
- [8] D. BENTAIFOUR « Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire $\text{NiCoMnGe}_x\text{Sn}_{1-x}$ », Mostaganem, Université ABDELHAMID IBN BADIS, Mémoire de Master (2017).
- [9] A. AKRICHE, « Etude des propriétés physiques des HEUSLER de type X_2MnY ($\text{X}=\text{Co}, \text{Ni}$, $\text{Y}=\text{Sn}, \text{Al}, \text{Ge}$) par la méthode FP-LMTO », Oran, Université MOHAMED BOUDIAF, Thèse de Doctorat, (2016).
- [10] B. HAMRI, « investigation théorique des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages Heusler » Ti_2VZ ($\text{Z}=\text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) », Sidi Bel-Abbes, Université DJILLALI LIABES, Thèse de Doctorat (2016).



**CONCLUSION
GÉNÉRALE**

Conclusion générale

Conclusion générale :

L'objectif de ce mémoire était de présenter une étude théorique des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés Heusler Ti_2Co (Al, Ga), en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisée (FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k et dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

L'investigation des propriétés structurales des alliages Heusler Ti_2Co (Al, Ga) a montré que les résultats relatifs au paramètre du réseau « a_0 » et au module de compressibilité (B_0) concordent bien avec les données théoriques disponibles dans la littérature.

Les résultats de calculs montrent que :

Les composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa sont stables dans la phase Cu_2MnAl .

Dans l'analyse des propriétés électroniques (densités d'états et structure de bandes), les calculs avec spins polarisés indiquent le caractère demi-métallique des composés Ti_2CoAl et Ti_2CoGa dans la phase Hg_2CuTi et le caractère métallique de ces composés dans la phase Cu_2MnAl .

Le moment magnétique total des deux composés dans la phase Hg_2CuTi est entier et vaut 2, ceci vient renforcer les résultats des propriétés électroniques qui traduisent leur caractère demi-métallique dans cette phase.

Tandis que dans la phase Cu_2MnAl le moment magnétique total n'est pas entier, Ti_2CoAl et Ti_2CoGa ont un caractère métallique.

Les atomes Ti (1) et Ti(2) contribuent largement dans le moment magnétique total dans les deux types structuraux. La contribution des atomes Al et Ga est faible, leurs moments magnétiques sont négligeables.

في هذا العمل أجرينا حساب *ab initio* لتحديد الخصائص البنيوية الإلكترونية و المغناطيسية للمركبات هيوسلر $Ti_2Co(Al,Ga)$ باستعمال تقريب الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW). في اطار نظرية تابعة الكثافة. الوظيفية (DFT) و بتقريب التدرج المعمم (GGA)

الحسابات مكنتنا من تحديد ثابت الشبكة البلورية في حالة التوازن (a_0) معامل الانضغاط (B_0) ومشتقه (B'_0) كما بينت بنية النطاق الإلكتروني و كثافة مستويات الطاقة لكلي اتجاهي الغزل أن المركبين Ti_2CoAl و Ti_2CoGa يظهران سلوكا نصف معدني. في الحالة البنيوية Hg_2CuTi .

اذن من هذه النتائج نستخلص أن مركبنا مرشحان جيدا ن للاستخدام في مجال السبين الإلكتروني.

الكلمات المفتاحية : هيوسلر-DFT- النصف المعدني.

Résumé

Résumé :

Dans ce mémoire, nous avons effectué un calcul ab initio pour déterminer les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages Heusler Ti_2Co (Al, Ga) en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisée (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

Les calculs nous ont permis de déterminer le paramètre de maille à l'équilibre (a_0) le module de compressibilité (B_0) et sa dérivée (B'_0).

La structure de bande et la densité d'états confirme pour les deux directions de spin que les deux composés Heusler Ti_2CoAl et Ti_2CoGa présentent un comportement demi-métallique dans la phase Hg_2CuTi .

Par conséquent ces alliages sont prédits être des candidats prometteurs dans les applications de la spintronique.

Mots clés : alliages Heusler-DFT-demi-métallicité

Abstract

Abstract :

In this work , we performed an ab initio calculation to determine the structural, electronic and magnetic properties of the full- Heusler alloys Ti_2Co (Al, Ga) using the linearized augmented plane wave method (FP-LAPW) based on density functional theory (DFT) and the generalized gradient approximation (GGA).

Calculations allowed us to determine the lattice parameter in equilibrium (a_0), compressibility modulus (B_0) and its derivative (B_0'). Band structure and density of states confirm for both directions of spins that the two Heusler compounds Ti_2CoAl And Ti_2CoGa exhibit a half metallic (HM) behavior with the $CuHg_2Ti$ -type structure.

Consequently, These alloys are predicted to be a promising candidate for the practical applications in spintronic devices.

Keywords : Heusler alloy-DFT-Halfmetallicity