



République Algérienne Démocratique et Populaire



Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
UNIVERSITE DE TISSEMSILET DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE

Faculté de Physique
Département de Physique

Spécialité : nanophysique

MEMOIRE

Présenté par :

Zerrouali Zohra

Nougal Yamina

**étude des propriétés structurales électroniques et magnétiques de demi-Heusler
LiCaB pour application en spintronique**

Qualité	Nom et Prénoms	Grade	Etablissement
Président	LAKHDER BOUMIA	Professeur	UNIVERSITE TISSEMSILT
Rapporteur	MOKHTARI MOHAMED	Professeur	UNIVERSITE TISSEMSILT
Examineur	DAHMANE FATEHLLAH	Professeur	UNIVERSITE TISSEMSILT

Année universitaire :2020-2021

Dédicace:

- *À l'âme pure de mon père, que Dieu lui fasse miséricorde*
- *Au bon cœur. À qui vous donnez et n'attendez pas de recevoir en échange de donner*

À la raison de mon existence dans la vie et le secret de ma réussite.

Ma mère, qui n'a cessé de m'encourager, que Dieu vous bénisse et te protège pour moi ;

- *À mon deuxième œil et mon soutien dans la vie, mes frères, et mes sœurs que Dieu les protège pour moi.*
- *Aux oiseaux de la maison, Lujain et Baraa*
- *à tous les amis*

À tous ceux qui j'aime et m'aiment.

zahra

Dédicace

- *Avant tout, je remercie Dieu de nous avoir donné la force, la chance et la patience d'en arriver jusque-là*
- *A l'homme de ma vie, mon précieux offre de dieu, mon exemple éternel, celui qui c'est toujours sacrifié pour me voir réussir à toi : « **Mon cher père** »*
- *A la lumière de ma vie, la flamme de mon cœur, tous les mots ne sauraient exprimer ma gratitude et ma reconnaissance pour vos dévouement et vos sacrifices, à : « **Mes chères mères** »*
- *A mes chères sœurs qui n'ont pas cessées de me conseiller, encourager et soutenir tout au long de mes études. Que Dieu les protèges et leur offres la chance et le bonheur.*
 - *A mes chers frère*
- *A celle qui est la plus chère à mon cœur une sœur d'une autre mère macopine « **khalida** » pour les soutiens moral, qui m'a assisté dans les moments difficile*
- *A mon binôme, ma copine durant le parcours universitaire « **Zahra** » en souvenir de notre sincère amitié et des moments agréable que nous avons passés ensemble.*
- *A la promotion 2020 /2021 de Master 2 nano physique*

Yamina

Remerciements:

Avant toute chose

Remerciez Dieu pour son succès et son illumination sur mon chemin afin que je puisse terminer cet humble travail

Et après. . . .

Je remercie beaucoup le distingué Dr. Mohamed Mokhtari d'avoir accepté d'être le directeur de ce mémoire. Qui nous a encadrés et guidés dans l'élaboration de ce travail. Je lui exprime ma sincère gratitude tout au long de ces années scolaires et pour ses conseils en plus du temps et de l'attention qu'il nous a accordés afin de fournir ce qu'il y a de mieux.

Je remercie également Dr. Dehmane Fathallah et Dr. Boumia Lakhdar, qui nous ont honorés en acceptant la participation à ce jury.

Je tiens également à remercier, sans exception, tous ceux qui ont contribué à ce travail.

Enfin, je n'oublie pas de remercier ma famille, tous mes amis, et toutes les personnes qui me souhaitent du succès de loin ou de près.

Résumé :

Dans ce modeste travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages semi-Heusler à base du composé LiCaB, en utilisant la méthode d'approximation GGA basée sur la théorie de fonctionnelle de la densité DFT implémentée dans le code de calcul WIEN2K. Le domaine d'application principal de ces alliages est la spintronique en raison de leurs propriétés, élevées ainsi la polarisation de spin au niveau de Fermi pour des spins down et un semi-conducteur au niveau de spin up.

Mots clés : Propriétés structurale, Électronique, Magnétique, Alliages semi-Heusler – DFT – LiCaB

Abstract :

In this modest work, we investigated the structural, electronic and magnetic properties of the semi-Heusler rare earth LiCaB on the functional theory of DFT density implemented in the WIEN2K computer code. The main field of application of these alloys is Spintronics due to their properties, as well as the spin polarization at the Fermi level for the spin down and the semiconductor at the spin up level.

Keywords: Structural, electronic and magnetic properties, semi-Heusler, Theory DFT

ملخص:

في هذا العمل المتواضع، قمنا بدراسة الخصائص التركيبية والإلكترونية والمغناطيسية لسبائك شبه Heusler بناءً على مركب LiCaB، باستخدام طريقة تقريب GGA المعتمدة على نظرية الكثافة الوظيفية DFT المطبقة في كود الحساب WIEN2K. المجال الرئيسي لتطبيق هذه السبائك هو spintronics نظرًا لخصائصها، مما يؤدي إلى زيادة استقطاب الدوران عند مستوى Fermi من أجل الدوران لأسفل وأشباه الموصلات عند مستوى الدوران لأعلى.

الكلمات المفتاحية: الخواص الهيكلية، الإلكترونية، السبائك المغناطيسية شبه الوسيطة – DFT -

LiCaB

Table des matières

Dédicace	I
Remerciements	III
Résumé.....	IV
Abstract.....	IV
Table des matières.....	V
Liste des Figures.....	VII
Liste des Tableaux.....	VIII
Introduction générale	01
Référence	04

Chapitre I : Généralité sur Heusler

I .1 Introduction	07
I .2 Full Heusler	09
I .3 Semi- Heusler	10
I .3.a Structure crustalline	11
I .3.b Compose Semi- Heusler	12
I .4 Demi-métallicité des alliage Heusler	15
I .5 Les composés Heusler dans les dispositifs les applications spintroniques	15
I .5.1 La magnétorésistance géante (GMR)	16
I .5.2 La magnétorésistance tunnel (TMR)	18
I .5.3 Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires(MRAM)	19
Référence	20

Chapitre II : Résultats Et Discussions

II.1 Introduction	23
II.2 Méthode de calcul	23
II.3 Résultatset discussion.....	25
II.3.1 Propriété structurale.....	25
II.3.2 Propriété Electronique	27
II.3.3 Propriété Magnétique	30
II.4 Effet de pression	30
II.5 Conclusion	32
Référence.....	33
Conclusion générale	36

Liste des Figures

- Figure 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 couleurs08
- Figure I.2** Structure générale des composés d'Heusler, (a). structure L_2L_1 (alliage d'Heusler) et (b). structure CL_b (demi-Heusler).....11
- Figure I.3** Illustration schématique de la densité des états (a) d'un métal, (b) semi-métal, (c) un métal (spin polarisé), (d) une ferromagnétique, (e) un ferromagnétique demi-métallique, (f) un ferrimagnétique demi-métallique14
- Figure I.4** Magnétorésistance géant dans une structure à base de multicouches d'alliage cobalt-fer avec du cuivre17
- Figure I.5** Architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonction tunnel magnétiques18
- Figure II.1** Evolution de l'énergie totale du composé LiCaB (trois phases α, β, γ) en fonction du volume26
- Figure II.2** Structure de bandes des électrons à spin -up de composé LiCaB (phase α)28
- Figure II.3** Densité d'états électronique (DOS) totale des composés LiCaB (phase α)29.
- Figure II.4** Une courbe graphique représentant les changements de la valeur de

pression à un moment magnétique31.

Liste des tableaux

Tableau I .1 Nombre ,nature et distance des premiers voisins de chaque type d'atome dans un alliage full-Heusler X_2YZ structure $L2_{1-a}$ et la paramètre de maille de l'alliage10

Tableau I .2 Occupation des sites et formule générales de différence ordre atomique des composés semi-Heusler12

Tableau II.1 Les position des atomes pour les trois phase (α, β, γ) de l'alliage LiCaB25

Tableau II.2 Le première dérivée par rapport à la pression (B'), l'énergie de l'état fondamentale $E_0(RY)$ pour composés d'heusler LiCaB26

Tableau II.3 Les moment partiel ,interstitiels et totaux du composé LiCaB30

Tableau II.4 Moment magnétique rn fonction de la pression30

Introduction générale

Introduction générale

Introduction générale :

La spintronique diffère fondamentalement de l'électronique traditionnelle en ce que, en plus de l'état de charge, les spins des électrons sont exploités comme un degré de liberté supplémentaire, avec des implications sur l'efficacité du stockage et du transfert des données. Les systèmes spintroniques sont les plus souvent réalisés dans des semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) et dans les alliages Heusler et présentent un intérêt particulier dans le domaine de l'informatique quantique et de l'informatique neuromorphique.

La spintronique est née dans les années 1980 après la découverte des phénomènes de transport d'électrons dépendant du spin dans les dispositifs semi-conducteurs. Cela comprend l'observation de l'injection d'électrons polarisés en spin d'un métal ferromagnétique à un métal normal par Johnson et Silsbee (1985)[5] et la découverte de la magnétorésistance géante par Albert Fert et al.[6] et Peter Grünberg et al. (1988).[7]. L'origine de la spintronique peut être attribuée aux expériences d'effet tunnel ferromagnétique/supraconducteur lancées par Meservey et Tedrow et aux premières expériences sur les jonctions tunnel magnétiques par Julliere dans les années 1970.[8] L'utilisation des semi-conducteurs pour la spintronique a commencé avec la proposition théorique d'un

transistor à effet de champ de spin par Datta et Das en 1990[9] et de la résonance de spin dipolaire électrique par Rashba en 1960.[10]

L'histoire de l'une des classes les matériaux les plus passionnants remonte a

l'année 1903, lorsque *Fritz Heusler* a découvert qu'un alliage de composition Cu_2MnAl se comporte comme un ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs ne soient pas magnétique. Ce matériau remarquable et ses équivalents, qui comprennent maintenant une vaste collection de plus de 1000

Introduction générale

composés, sont maintenant connus comme composés ou alliages Heusler. En effet, d'excellentes propriétés thermoélectriques ont été récemment mises en évidence pour ces matériaux.

La grande classe de composés magnétiques X_2YZ montre toutes sortes de comportement magnétique tels que magnéto-optique, magnéto calorique et les caractéristiques magnéto-structurelle.

L'intérêt majeur de certains alliages d'Heusler peuvent être magnétiques et présenter une structure électronique très différente selon le spin, ainsi la bande de valence de spin majoritaire peut être métallique, alors que la bande de valence de spin minoritaire peut être isolante ou semi-conductrice. Les composés Heusler demi métallique à base de Li, Ca et B ont un grand intérêt en raison de leurs températures de Curie élevées et sont utilisés aujourd'hui dans les jonctions magnétiques à effet tunnel [11].

Les composés de Heusler sont souvent été compris comme des alliages intermétalliques, bien que la description en tant que composé intermétallique est plus appropriée en raison de leur ordre atomique caractéristique. Le composé half Heusler ternaire a une formule générale XYZ, dans laquelle X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Cependant, dans certains cas, Y est remplacé comme un élément de terre rare ou d'un métal alcalino-terreux. Traditionnellement, le métal, qui existe deux fois, est placé au début de la formule, tandis que l'élément du groupe principal est placé à l'extrémité [12].

◆ Dans ce mémoire nous allons étudier les propriétés structurales électroniques et magnétiques des alliages semi-Heusler des composés LiCaB par l'approximation de gradient généralisé (GGA) sous la forme proposée par Perdew et al (PBEsol) implanté dans le code Wien2K qui est basé sur la méthode de la fonctionnelle de la densité. Après une introduction générale, notre travail est exposé en trois

Introduction générale

chapitres.

⇒ Dans le premier chapitre on parle de la spintronique et les alliages semi-Heusler et les matériaux utiliser dans ces alliages, qu'elle que phénomène liés à la technologie.

⇒ Le deuxième chapitre de ce mémoire est consacré aux constatations et aux discussions :

Dans un premier temps, nous donnons les détails du calcul. Ensuite, nous présentons nos résultats et leurs interprétations concernant les propriétés structurelles, électroniques et magnétiques du composite LiCaB, ainsi qu'une comparaison avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

Référence :

[1] Wolf, S. A.; Chtchelkanova, A. Y.; Treger, D. M. (2006). "Spintronics --A retrospective and perspective". IBM Journal of Research and Development. 50: 101– 110. [doi:10.1147/rd.501.0101](https://doi.org/10.1147/rd.501.0101)

[2] Physics Profile: "Stu Wolf: True D! Hollywood Story"^[dead link]

[3] Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future. Sciencemag.org (16 November 2001). Retrieved on 21 October 2013.

[4] Jump up to:^{a b} Bhatti, S.; et al. (2017). "Spintronics based random access memory :areview". Materials Today. 20 (9):530548.DOIT/10.1016/j.matod2017.07.007.

[5] Johnson, M.; Silsbee, R. H. (1985). "Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals". Physical Review Letters. 55 (17): 1790–1793. Bibcode:1985PhRvL..55.1790J. doi:10.1103/PhysRevLett.55.1790. PMID 10031924.

[6] Baibich, M. N.; Broto, J. M.; Fert, A.; Nguyen Van Dau, F. N.; Petroff, F.; Etienne, P.; Creuzet, G.; Friederich, A.; Chazelas, J. (1988). "Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices" (PDF). Physical Review Letters. 61 (21): 2472–2475. Bibcode:1988PhRvL..61.2472B. doi:10.1103/PhysRevLett.61.2472. PMID 10039127.

.

Introduction générale

[7] Binasch, G.; Grünberg, P.; Saurenbach, F.; Zinn, W. (1989). "Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange". *Physical Review B*. 39 (7): 4828–4830.

Bibcode:1989PhRvB..39.4828B. doi:10.1103/PhysRevB.39.4828. PMID 9948867

[8] Julliere, M.(1975). "Tunneling between ferromagnetic films". *Physics Letters A*. 54 (3): 225–226. Bibcode:1975PhLA...54..225J. doi:10.1016/0375-9601(75)90174-7.

[9] Datta, S. & Das, B. (1990). "Electronic analog of the electrooptic modulator". *Applied Physics Letters*. 56 (7): 665–667.

Bibcode:1990ApPhL..56..665D. doi:10.1063/1.102730.

[10]E. I. Rashba, Cyclotron and combined resonances in a perpendicular field, *Sov. Phys. Solid State* 2, 1109 -1122 (1960)

[11]H.Zenasni.Étude théorique des propriétés magnétiques, électronique et structurales des alliages de Heusler. Université de Tlemcen.6.2013.

[12]K.Benabadji,Mémoire de Magister,(ABB)Tlemcen,(2009).

Chapitre I

Généralité sur heusler

I .1) Introduction :

L'électronique actuelle repose sur une propriété essentielle d'une particule élémentaire (électron), sa charge électrique. Avec le développement poussé de la technique du silicium (technique top-down), la gravure des circuits intégrés va atteindre une limite physique de miniaturisation qu'il ne sera pas possible de dépasser sans devoir repenser le concept même de cette technique (développement d'une électronique moléculaire ou une autre technique bottom-up). La spintronique (ou électronique de spin) telle que développée en ce moment repose sur la technique du silicium, bien maîtrisée, mais permet d'exploiter une propriété supplémentaire de l'électron, la propriété quantique de spin. La spintronique ouvrira des portes à des applications nouvelles, sans pour autant modifier totalement la technique employée par les fondeurs. elle est une technique qui exploite la propriété quantique du spin des électrons dans le but de stocker des informations.

En effet l'électronique classique est basée sur le contrôle des porteurs, mais dans la spintronique on utilise une caractérisation quantique des électrons (spin) quantifiés selon deux valeurs opposées spin up (+1/2) et spin down (-1/2) ainsi la combinaison de la charge électronique et du spin de l'électron un nouveau degré de liberté.

Les alliages heusler ont une histoire de la classe de matériaux la plus excitante datant de 1903, lorsque Fritz Heusler a découvert qu'un alliage avec la composition de Cu_2MnAl se comporte comme un alliage magnétique, même si ses composants ne sont pas magnétiques, ce matériau merveilleux et son équivalent, qui se compose maintenant d'un grand groupe de plus de 1000 composés. maintenant connus sous le monde composés ou d'alliages heusler, ce

Chapitre I Généralité sur heusler

sont des matériaux triples semi-conducteurs ou métalliques avec un mélange 1 :1 :1 (également connu sous le nom de half-heusler ou un mélange de mesure de performance 2 :1 :1 (connu sous le nom de 'full heusler ' . La grande classe de composés magnétique X_2YZ présente toutes sortes de comportements magnétique et propriétés magnétiques multifonctionnelles ,telle que propriétés magnéto-optique et magnétiques des alliages métalliques ,bien que la description en tant que composé interminéral soit plus appropriée en raison de sa diposition atomique ,caractéristique ,le composé intermédiaire triple contient une formule générale X_2YZ ou X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément du group III.IVet V dansle tableau périodique ,mais dans certain cas Y est remplacé par un élément de terre rare ou un metale alcalin converrtionnel, le métale terreux ,qui est le métale présent deux fois ,ou le début de la formule , tendisquel'élémentde group.

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		

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

Chapitre I Généralité sur heusler

I.2) Full heusler :

Full-Heusler de type X₂YZ qui cristallisent dans le groupe d'espace cubique Fm-3m (groupe d'espace N° 225) avec Cu₂MnAl (L21) comme prototype. Les atomes X occupent la position 8c (1/4, 1/4, 1/4), les atomes Y et les atomes Z sont situés aux positions 4a (0, 0, 0) et 4b (1/2, 1/2, 1/2), respectivement. Cette structure se compose de quatre sous-réseaux cfc interpénètrents, deux sont occupés par l'atome X. Une structure de type rock salt est formée par les éléments les moins et les plus électropositifs (atomes Y et Z). En raison du caractère ionique de leur interaction, ces éléments ont les coordonnées octaédriques. D'autre part, tous les sites tétraédriques sont occupés par l'atome X. Cette structure peut aussi être considérée comme une structure zinc blende. Dans la littérature, les composés Heusler sont souvent décrits par une super structure CsCl [2].

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																	
		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		

Chapitre I Généralité sur heusler

atome	1 ^{er} voisins	d/a_0	2 nd voisins	d/a_0	3 ^e voisins	d/a_0
X	4Y et 4Z	0.433	6X	0.5	12X	0.707
Y	8X	0.433	6Z	0.5	12Y	0.707
Z	8X	0.433	6Y	0.5	12Z	0.707

Tableau(I.1): Nombre, nature et distance des premiers voisins de chaque type d'atomes dans un alliage full-Heusler X_2YZ DE structure $L2_{1-a}0$ et le paramètre de maille de l' alliage [3]

I .3) Semi HeuslerXYZ :

En général, les alliages semi-Heusler XYZ peuvent être compris comme des composés constitués de deux partie, une partie covalente et une autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique. La nomenclature dans la littérature varie beaucoup, allant de trier les éléments par ordre alphabétique, selon leur électronégativité ou d'une façon aléatoire, et donc, toutes les trois permutations possibles peut être trouvées. 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 et c'est un élément d'un groupe principal de la seconde moitié de la classification périodique, par exemple, LiAlSi, ZrNiSn, LuAuSn. Il doit être noté que le

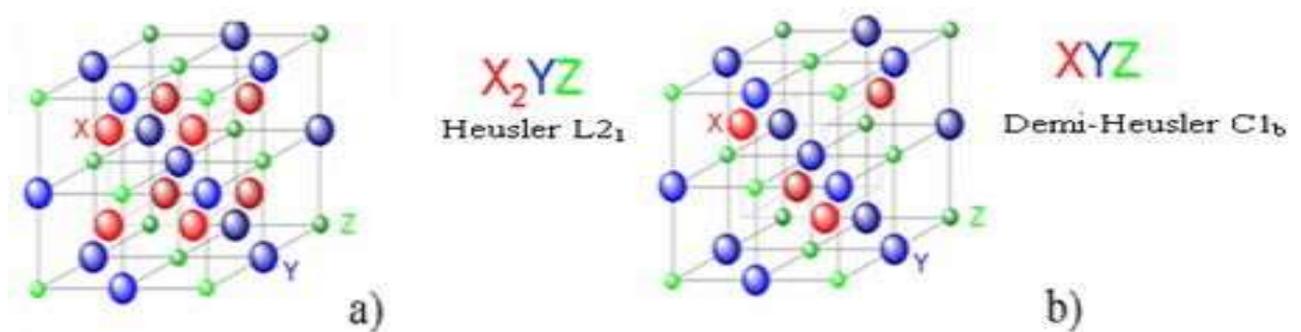
Chapitre I Généralité sur heusler

choix de position atomique pour les éléments X, Y et Z ne peut pas être directement dérivé de cette nomenclature et on doit faire attention dans ce

choix parce que souvent de mauvaises positions utilisés dans les modèles théoriques mènent à de mauvais résultats [4].

I .3.a) Structure cristalline :

Les composés de la premier famille on la formule générale XYZ et cristallise selon une structure cubique non Centro symétrique (group spatial no .216, F43m, CIB), qui est un système ternaire de structure CaF2 et peut être déduit de la structure tétraédrique de type ZnS en remplissant les sites du réseau octaédrique. Ce type de structure semi-heusler peut être caractérisé par l'interpénétration de trois réseaux cubique a face centré (cfc), dans chacun est occupée par les atomes X, Y et Z les positions occupées sont 4a (0, 0,0) 4b (1/2,1/2,1/2) et 4c (1/4,1/4,1/4) En principe, trois arrangement atomiques non équivalents sont possibles dans sont type de structure [2].



Figure(I.2):Structure générale des composés d'Heusler,

(a).StructureL₂₁(alliégé'Heusler) et (b).StructureC1_b(demi-Heusler).

Chapitre I Généralité sur heusler

I .3.b) compose semi-heusler :

Les composés de semi-Heusler présentent un ferromagnétique semi-métallique HMF. Ils ont un gap énergétique dans une direction de spin au niveau de Fermi alors que l'autre direction est fortement métallique ceci résulte en une spin polarisation des électrons de conduction.

Occupation des sites	Formule générale	SB	Group d'espace
4a, 4b, 4c	XYZ	C1 _b	F-43m (N°.216)
4a=4b, 4c	XZ ₂	C1	Fm-3m(N°.225)
4a, 4b, 4c=4d	X ₂ YZ	L2 ₁	Fm-3m(N°.225)
4a=4b, 4c=4d	XZ	B2	Pm-3m(N°.221)
4a=4c, 4b=4d	YZ	B32a	Fd-3m(N°.227)
4a=4b=4c=4d	X	A2	Im-3m(N°.229)

Tableau I.2: Occupation des sites et formules générales de différence ordre atomique des composés semi heusler

I .4) Demi-métallicité des alliages Heusler :

De Groot et al. ont découvert le concept de demi-métal ferromagnétique pour la première fois en s'intéressant au calcul de la structure de bande d'alliages demi-Heusler(NiMnSb)[5]. Conventionnellement .

les matériaux ferromagnétique présentent une densité d'états électronique ($N(E_F)$) au niveau de Fermi pour les électrons de spin majoritaires (up : $N\uparrow(E_F)$) et de spin minoritaires (down : $N\downarrow(E_F)$). La polarisation P en spin, qui

Chapitre I Généralité sur heusler

mesure l'asymétrie en spin était alors définie par l'expression suivante[6] :

$$P = \frac{N_{\uparrow}(EF) - N_{\downarrow}(EF)}{N_{\uparrow}(EF) + N_{\downarrow}(EF)} \quad (I.1)$$

La fonctionnalité ferromagnétisme demi-métallique présente une asymétrie entre les états de spin up et de spin down au niveau de la structure de bandes énergétiques, ce qui résulte des propriétés de conduction totalement différentes entre les spins minoritaires et les spins majoritaires.

Plus précisément, la demi-métallicité s'agit d'un état de la matière où certains matériaux comme les composés d'Heusler montrent des propriétés métalliques pour une direction de spin, tandis qu'ils présentent des propriétés semi-conductrice ou même isolante dans l'autre orientation de spin. Ceci donne lieu à des polarisations des électrons de conduction au niveau de Fermi qui peuvent atteindre les 100%, envisageant alors de forts effets magnéto résistifs (magnéto résistance tunnel et magnéto résistance géante).

La classification citée ci-dessus donne les différents types de ferromagnétisme demi-métallique[7]

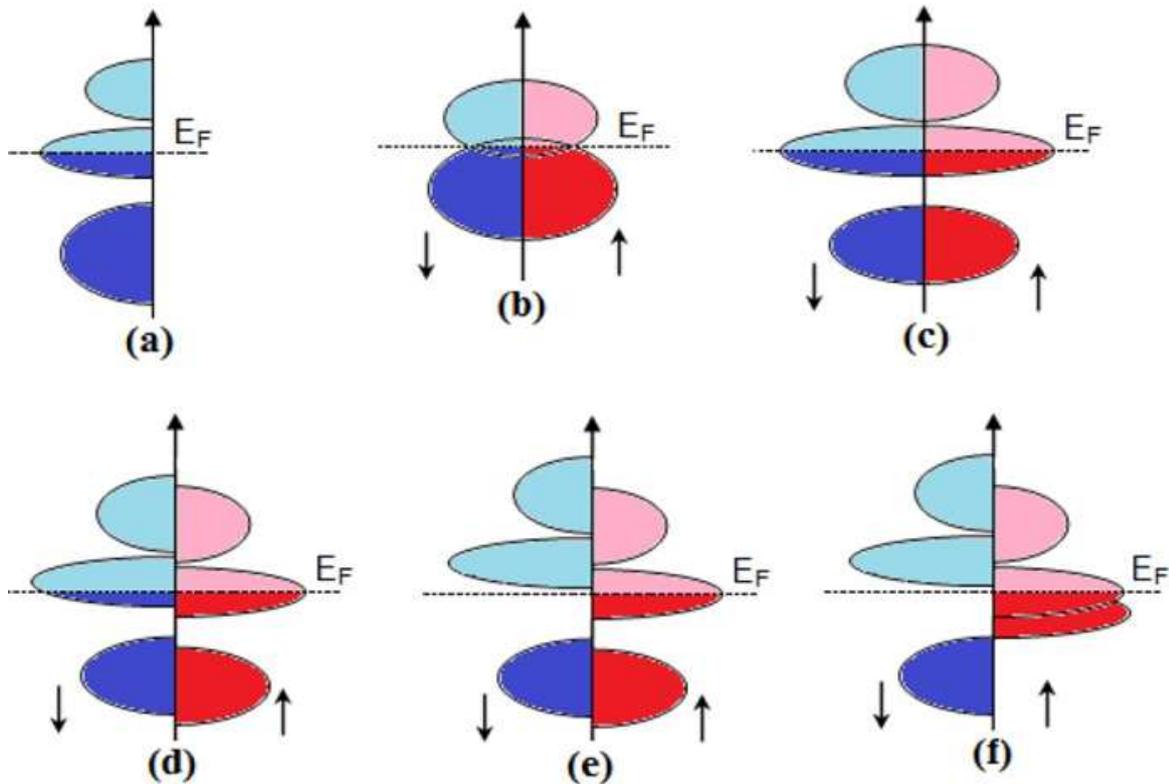


Figure I.3: Illustration schématique de la densité des états (a) d'un métal, (b) semi-métal, (c) un métal (spin polarisé), (d) un ferromagnétique, (e) un ferromagnétique demi-métallique, et (f) un ferrimagnétique demi-métallique[7].

Cette figure donne une représentation simplifiée de la densité d'états(DOS)de:

⇒un métal avec une densité d'états au niveau de Fermi,

⇒(b) un semi-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 tout 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

Chapitre I Généralité sur heusler

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,

⇒(f) le cas d'un demi-métal ferrimagnétique[7].

I .5) Les composés Heusler dans les dispositifs pour les applications spintroniques :

Ces dernières années, la spintronique, ou électronique de spin, est devenue incontournable dans le domaine du stockage de l'information. Bien que ce mémoire se focalise principalement sur l'étude de matériaux magnétiques notamment les alliages d'Heusler, nous avons décidé de présenter cette section en raison de l'importance de la spintronique dans le développement de nouveaux matériaux magnétiques.

Avec la découverte de la magnétorésistance géante (GMR), l'électronique de spin ou la spintronique a suscité un intérêt commercial et de recherche intense notamment dans le domaine du stockage de l'information. Des capteurs magnéto

résistifs peuvent être trouvés dans la tête de lecture de chaque lecteur de disque dur sur le marché sont également utilisés pour toute autre application où une détermination précise d'un état magnétique est nécessaire (Chaque année, plus de 600 millions de têtes de lecture GMR sont fabriquées par l'industrie informatique). La spintronique continue à se répandre vers des applications telles que la mémoire magnétique à accès direct (MRAM) qui est conçue pour remplacer la technologie actuelle à base de transistors. Les progrès dans la manipulation du spin plutôt que de la charge électronique offrirait un état logique stable lorsque le dispositif est éteint, mais matériaux nécessaires à la

Chapitre I Généralité sur Heusler

mise en œuvre de tels processus nécessitent un nouvel ensemble de propriétés. Les ferromagnétiques typiques des métaux de transition ne sont pas adaptés à la manipulation de spin en raison de la capacité de polarisation de spin inférieure, d'où une efficacité d'injection à faible spin, habituellement inférieure à 50%. Les composés et alliages Heusler semi-métalliques sont un candidat de premier plan pour remplacer les matériaux actuels et offrir une polarisation de spin beaucoup plus grande, qui pourrait atteindre 100%. Les alliages Heusler offrent une large gamme de matériaux avec des propriétés magnétiques et des propriétés de transport électronique réglables pour la nouvelle technologie de stockage de données [8]. La spintronique possède des applications importantes, les plus répandues étant la lecture des disques durs par la GMR, la magnétorésistance tunnel (TMR: Tunnel MagnetoResistance) et l'écriture des mémoires magnétiques (MRAM : Magnetic Random Access Memories) dans nos ordinateurs.

I .5.1) La magnétorésistance géante (GMR) :

La magnétorésistance géante a été découverte dans des couches monocristallines en 1988 par deux équipes indépendantes : celle d'Albert Fert, de l'Université de Paris Sud-Orsay, et celle menée par Peter Grünberg du centre de recherche de Jülich (Rhénanie-du-Nord-Westphalie, Allemagne). Le 9 Octobre 2007, Albert Fert et Peter Grünberg ont reçu conjointement le prix Nobel de physique pour leur découverte.

Dans des structures alternant un métal magnétique et un métal non magnétique, un changement de résistance important est observé lorsque, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, les aimantations macroscopiques des couches magnétiques successives basculent d'un état antiparallèle à un état parallèle. La figure (I.4) montre la variation de la résistance dans une telle

Chapitre I Généralité sur heusler

structure entre les deux cas extrêmes d'alignement. Des structures plus complexes ont ensuite été développées pour augmenter la sensibilité de l'élément magnétorésistif. Il s'agit de ce qu'on appelle des vannes de spin.

La magnétorésistance géante est l'outil adéquat pour détecter des champs magnétiques de très faible amplitude. L'application principale a été développée dans les années 90. Elle concerne les têtes de lecture pour disques durs où un petit élément magnétorésistif détecte la variation de champ magnétique généré par les transitions entre bits de données dans un support d'information et transcrit l'information sous la forme de pulses électriques images du changement de résistance. Aujourd'hui, la totalité de la production mondiale des têtes de lecture/écriture pour disques durs est constituée de têtes magnéto résistives de type vannes de spin.

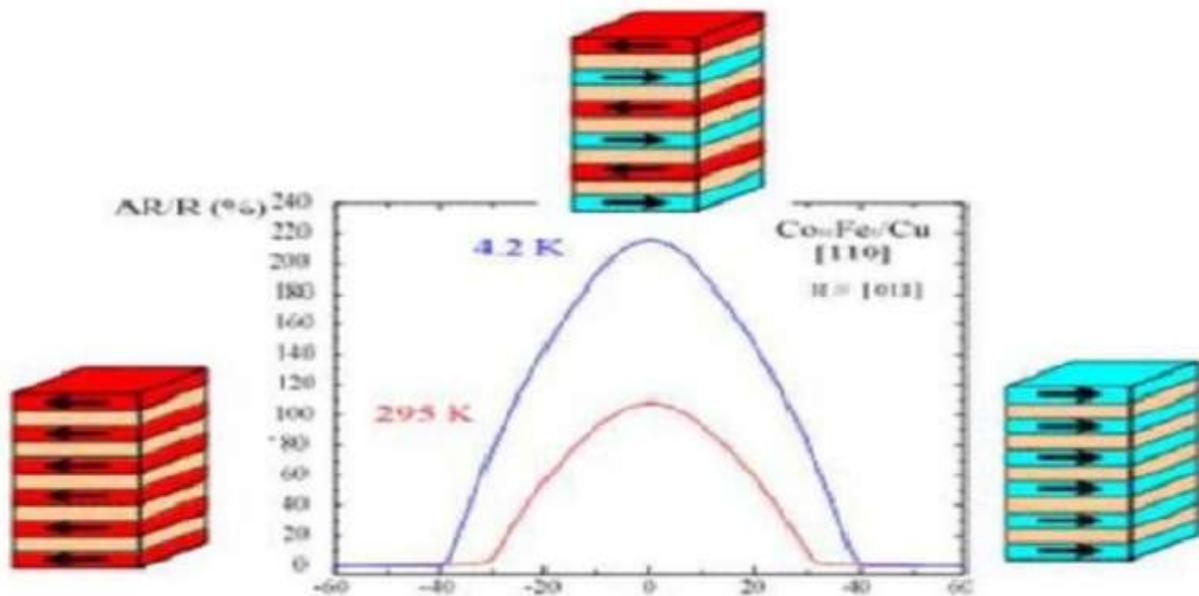


Figure (I.4): Magnétorésistance géante dans une structure à base de multicouches d'alliage cobalt-fer avec du cuivre [9].

I.5.2) La magnétorésistance tunnel (TMR) :

Le monde de la science a été aussi témoin d'une autre découverte, appelée magnétorésistance tunnel MRT (ou TMR pour Tunnel Magnetoresistance), assisté par les travaux de Modéra et al. Sur des empilements Co/Al₂O₃/CoFe[10]. En réalité, les premières observations de la magnétorésistance tunnel ont été faites par Jullière en 1975 [11]. Mais, ce n'est qu'en 1995 que la MRT a connu un regain d'intérêt. Cet effet qui est similaire « macroscopiquement » à la magnétorésistance géante peut-être observé dans les systèmes Ferro/Isolant/Ferro et se manifeste comme une variation de résistance électrique, d'un courant traversant l'isolant par effet tunnel, en fonction de la configuration de matériaux ferromagnétiques. Le dispositif le plus utilisé dans les technologies actuelles (mémoires MRAM par exemple), exploitant la MRT, est la jonction tunnel magnétique (MTJ pour Magnetic Tunnel Junction) (Figure(I.7)). Tandis que, le mécanisme physique à l'origine de la magnétorésistance tunnel dépend de l'asymétrie de spin, de la structure électronique de l'isolant et du caractère des liaisons électroniques à l'interface métal/isolant.

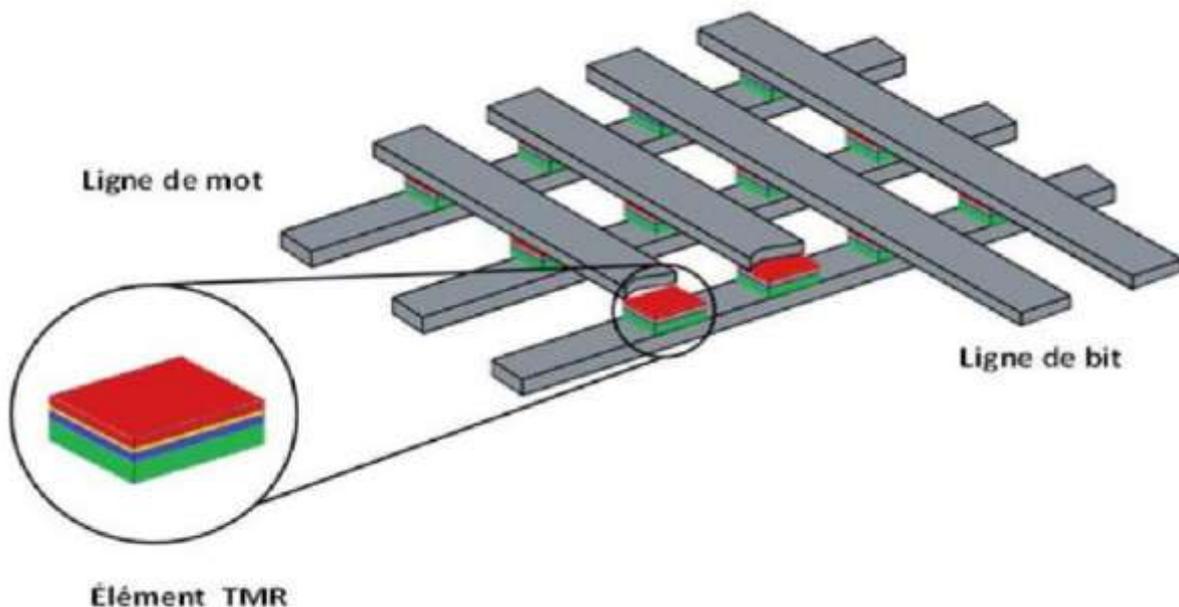


Figure (I.5) : Architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonctions tunnels magnétiques [12].

I .5.3) Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM) :

La forte variation de magnétorésistance à température ambiante, trois fois supérieure à la magnétorésistance géante, permet d'utiliser ces structures comme cellules de stockage dans des mémoires non volatiles à accès aléatoire. Dans ces mémoires, appelées MRAM (MagneticRandom Access Memories) [13], l'information n'est plus stockée sous la forme d'une charge dans une capacité, comme c'est le cas des mémoires semi-conductrices de type DRAM ou Flash, mais sous la forme d'une direction d'aimantation dans la jonction tunnel magnétique.

Chapitre I Généralité sur heusler

Référence :

[1]ZENASNI Hocine, "Etude Théorique des Propriétés Magnétiques, Électroniques et Structurales des Alliages Heusler". Thèse de Doctorat en Physique, Université Abou BakrBelkaïd - Tlemcen, Algérie, 2013

[2]S.Belghit.Étude des propriétés électroniqueet magnétiques del'alliagedeHeuslerFeCo. Mémoire de Master en physique. Université de Larbi Tébéssi -Tépassa. 2016

[3]Barthélémy PRADINES, "Structure électronique et propriétés magnétiques statiques et dynamiques d'alliages d'Heusler partiellement désordonnés et d'hétéro-structures tout- Heusler". Thèse de Doctorat de l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier - France, 2017

[4] H.Zenasni. Étude théorique des propriétés magnétiques, électronique et structurales desalliagesdeHeusler. Université de Tlemcen.6.2013.

[5] 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).

[6] M.Hehn,F.Montaigne,A.Schuhl,«Magnetoresistance geante et électronique de spin » , Techniques de l'Ingenieur l'expertise technique et scientifique de référence ,10-Nov-2002.

[7] M.N.Baibich,J.M.Broto,A.Fert,F. Nguyenvan Dau, F.Petroff, P.Etienne, PhysRevLett61(1988)2472.

[8] Teodor HUMINIUC, "Novel Anti ferromagnets for Spintronic Devices " .Doctor of Philosophy, University of York, Physics, April 2017.

[9] BELKHOUANE Mohammed, "Etude de premier principe des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des matériaux Heusler de type

Chapitre I Généralité sur heusler

Fe₂MnZ (Z = Al, Si) Fe₂MnAl_{0.5}Si_{0.5}". Thèse de Doctorat en Sciences Physiques, Université DjillaliLiabès de Sidi Bel Abbès, Algérie. 2016.

[10] J.S. Moodera, L.R. Kinder, J. Nowak, P. LeClair, R. Meservey. Appl. Phys.Lett.,69(1996) 708-710.

[11] M. Jullière. Phys.Lett. A.,**54**(1975) 225-226.

[12]W.J. Gallagher, S.P.P. Parkin, IBM J, Res. & Dev.,50 (2006) 1-5.

[13]S. Das Sarma, "Spintronics", American Scientist,.89 (2001) 516.

Chapitre II :

Résultats et discussion

II .1) Introduction :

Ces dernières années, la croissance rapide de la magnéto-électronique et de la spintronique a intensifié l'intérêt de la recherche pour la recherche de nouveaux matériaux magnétiques tels que les semi-ferromagnétiques métalliques (HMF). Le concept de ferromagnétisme HM a été prédit pour la première fois par de Groot et al. en 1983 [1] sur la base de calculs de structure de bande des alliages demi-Heusler NiMnSb et PtMnSb. Plusieurs classes de ferromagnétiques HM ont été prédits théoriquement ou confirmés expérimentalement tels que les alliages Heusler et demi-Heusler, les oxydes de métaux de transition, les manganites de pérovskite....Les ferromagnétiques HM excluant les métaux de transition ont été prédits théoriquement, par exemple, les composés I-V, IIV, I-IV et II-IV dans les structures ZB et rocksalt [2-4].

De nos jours, les composés Heusler ont attiré un grand intérêt pour la spintronique en raison de leur température de curie élevée et de la similitude structurelle avec les semi-conducteurs conventionnels à structure zinc-blende. Ces faits ont motivé nous à la recherche de nouveaux alliages semi Heusler ferromagnétiques semi métalliques. Dans ce travail, nous rapportons l'étude théorique de la structure électronique et du magnétisme de composé demi Heusler LiCaB.

II.2) Méthode de calcul :

Nous avons effectué les calculs en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW)[6] basé sur la théorie fonctionnelle de densité (DFT), implémentée dans le code WIEN2k[7], qui est la méthode la plus efficace pour le calcul des propriétés à l'état fondamental des matériaux[8].

Pour obtenir les propriétés structurelles, les effets d'échange et de corrélation sont traités avec l'approximation de gradient généralisé (GGA) sous la forme

proposée par Perdew et al (PBEsol). l'espace est divisé en une région interstitielle (IR) et des sphères « muffin-tin » non chevauchantes (MT) centrées sur les sites atomiques. Dans la région (IR), l'ensemble de base est constitué d'ondes planes. À l'intérieur des sphères MT, les fonctions de base sont développées en fonctions harmoniques sphériques. Pour l'expansion de la fonction d'onde à l'intérieur des sphères « muffin-tin », nous prenons la valeur maximale du moment cinétique $l_{\max} = 10$. Un paramètre de coupure $RMT.K_{\max} = 7$ est utilisé pour contrôler la convergence de l'ensemble de base, où RMT est le plus petit rayon de sphère « muffin-tin » et K_{\max} est le plus grand vecteur de réseau réciproque utilisé dans l'expansion des ondes planes dans la région interstitielle. L'amplitude du plus grand vecteur dans l'expansion de Fourier de densité de charge utilisée est $G_{\max} = 14$ (u.a)⁻¹. Le seuil d'énergie sélectionné entre les états de cœur et les états de valence est de -6 Ry

Les composés demi-Heusler ont la formule générale XYZ et cristallisent dans une structure cubique MgAgAs (C1b) non Centro symétrique avec le groupe spatial F-43m. Ces composés sont également appelés demi-Heusler ou Juza – Nowotny, qui appartiennent à la classe des composés tétraédriques chargés (FTC) [9]. La structure de ces composés provient de trois réseaux fcc interpénétrés d'atomes X, Y et Z et les positions Wyckoff correspondantes sont r_1 (0,5, 0,5, 0,5), r_2 (0, 0, 0) et r_3 (0,25, 0,25, 0,25). Les atomes X en r_1 et Y en r_2 forment un réseau de rocksalt et l'atome Z se trouve en r_3 dans les centres des tétraèdres formés par les atomes X et Y. En général, il existe six façons de répartir les atomes X, Y et Z sur les trois sous-réseaux. Pour des raisons de symétrie, l'échange d'atomes en r_1 et r_2 donne une structure équivalente. Par conséquent, en inter changeant les positions des atomes dans la structure cubique (C1b), seules trois phases (α , β et γ) sont formées. c'est-à-dire que les atomes X, Y, Z sont disposés à différentes positions (r_1, r_2, r_3), (r_3, r_1, r_2) et (r_2, r_3, r_1) respectivement. Certaines études expérimentales montrent que la

structure des composés demi-Heusler dépend du désordre atomique, par conséquent, l'étude des composés XYZ dans les trois arrangements possibles est nécessaire. La structure cristalline (C1b) de ce type de matériau est bien discutée dans la littérature [10, 11].

	Li	Ca	B
Phase α	(0.0.0)	(1/2.1/2.1/2)	(3/4.3/4.3/4)
Phase β	(1/4.1/4. 1/4)	(0.0.0)	(3/4.3/4.3/4)
Phase γ	(0.0.0)	(1/4.1/4.1/4)	(3/4.3/4.3/4)

Tableau (II .1) : Les positionsdes atomes pour les trois Phase (α,β,γ) de l'alliage LiCaB

II.3) Résultats et discussions :

II.3.1) Propriété structurale :

possibles, à savoir les phases (α , β et γ) comme indiqué dans le tableau (II .1). Tout d'abord, il est nécessaire de définir la disposition correcte du positions atomiques dans le cristal [28, 29]. Dans la structure demi-Heusler C1b, le LiCaB adopte trois agencements

Le calcul de l'énergie totale révèle que le composé a une énergie la plus basse dans la phase α plutôt que dans la phase β ou γ comme calculé et illustré à la figure (II.2). Pour vérifier avec quelle phase de structure le LiCaB a l'état fondamental ferromagnétique, nous effectuons les calculs d'énergie totale pour le composé dans les configurations ferromagnétique, non magnétique.

La figure (II.3) montre l'énergie totale en fonction du volume à différents arrangements atomiques et configurations d'état fondamental de polarisation de spin, respectivement. Les résultats calculés indiquent que l'agencement de la

phase α se révèle être énergétiquement plus favorable avec un état fondamental ferromagnétique (FM) pour ce composés. Les

énergies totales calculées en fonction du volume sont ajustées à l'équation d'état empirique de Murnaghan [30] pour déterminer les propriétés de l'état fondamental

	$a_0(\text{Å}^\circ)$	B_0	B_0'	E_0
Phase α	6.2252	34.7669	4.9098	-1425.415395
	6.22[12]	41[12]		
Phase β	6.3285	26.7186	5.8203	-1425.303663
Phase γ	5.9983	38.3118	4.2574	-1425.359920

Tableau (II.2) : le paramètre de maille ($a, \text{Å}^\circ$), le module de compressibilité à l'équilibre (B, GPa) et sa première dérivée par rapport à la pression (B'), l'énergie de l'état fondamentale $E_0(\text{Ry})$ pour le composés d'Heusler LiCaB

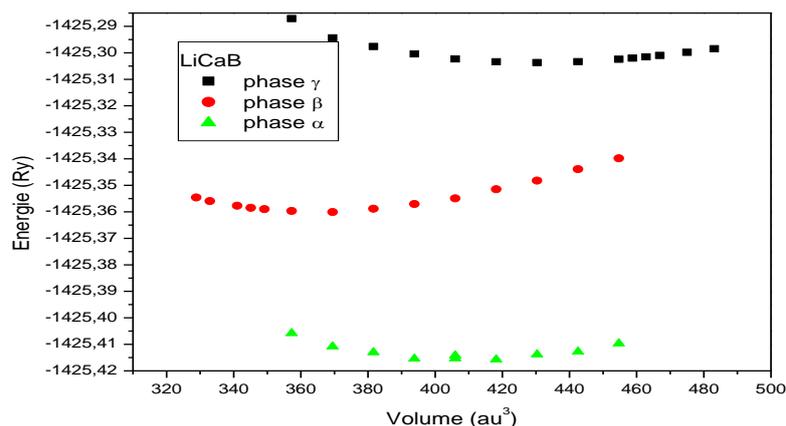
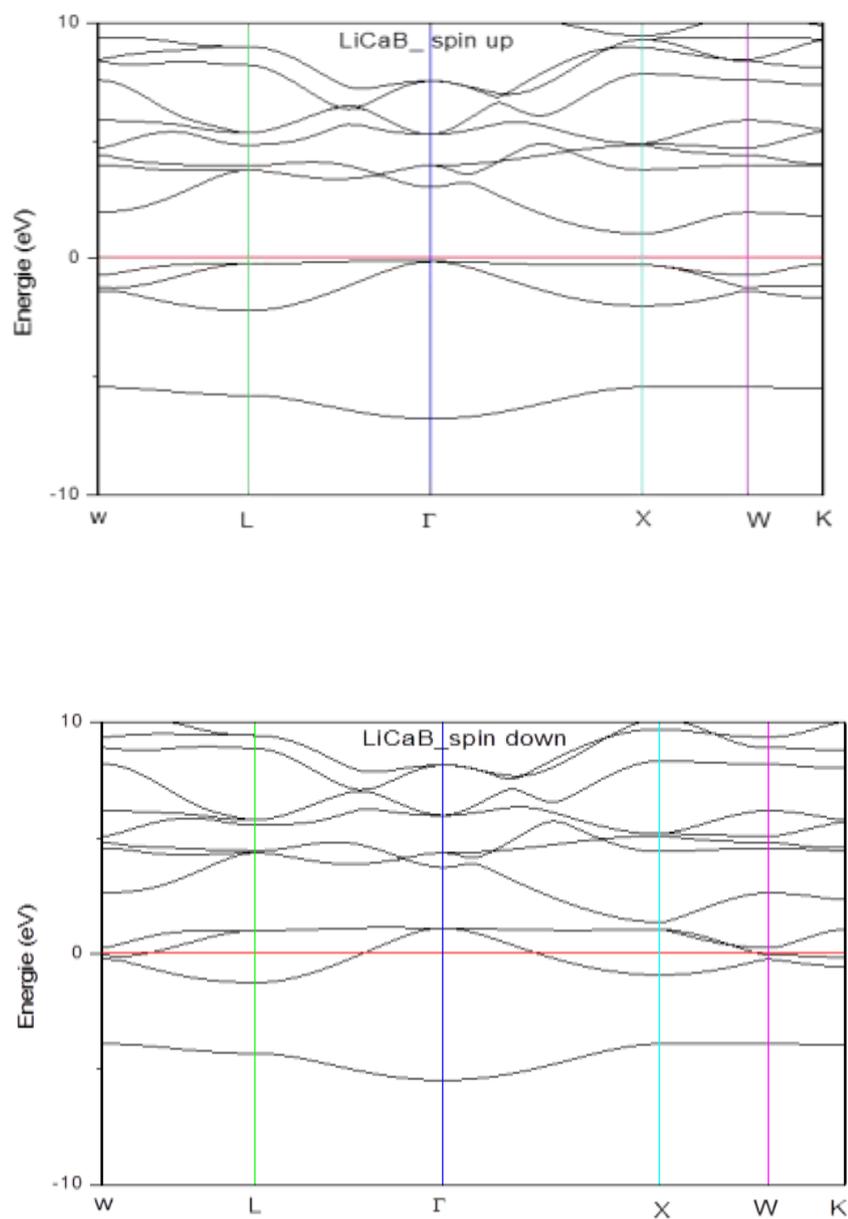


Figure (II.1) : Evolution de l'énergie totale du composé LiCaB (dans trois Phase α, β, γ) En fonction du volume

II.3.2) Propriété électronique :

La théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons à l'intérieur d'un solide. Une bande d'énergie électronique résulte de l'hybridation des niveaux individuels des atomes. Les orbitales liantes forment la bande de valence et les anti-liantes forment la bande de conduction. Ces deux bandes sont séparés par une bande d'énergie interdite de largeur E_g appelée « gap ». Ce dernier est défini par la différence d'énergie absolue entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence.

Dans cette étude nous présentons les propriétés électronique du composé demi-Heusler LiCaB. La structure des bandes est calculée et présentée sur la figure (II.2). Nous remarquons sur la figure (II.2) que la structure de bandes des deux spins (majoritaire et minoritaire) ne sont pas semblables. Nous observons pour la structure du spin up calculée par l'approximation GGA, donne un gap indirect positif, d'une valeur $E_g(\Gamma \rightarrow X) = 1.19$ eV. La structure du spin down présente un minimum de bande d'énergie de conduction situé au dessous du niveau de Fermi (E_F) chevauchée avec les bandes d'énergie de valence. Cette différence entre les deux spins affirme que le composé LiCaB est un semi-métal.



Figure(II.2) : structure de bandes des électrons à spin-down et spin-up de composé LiCaB (Phase α)

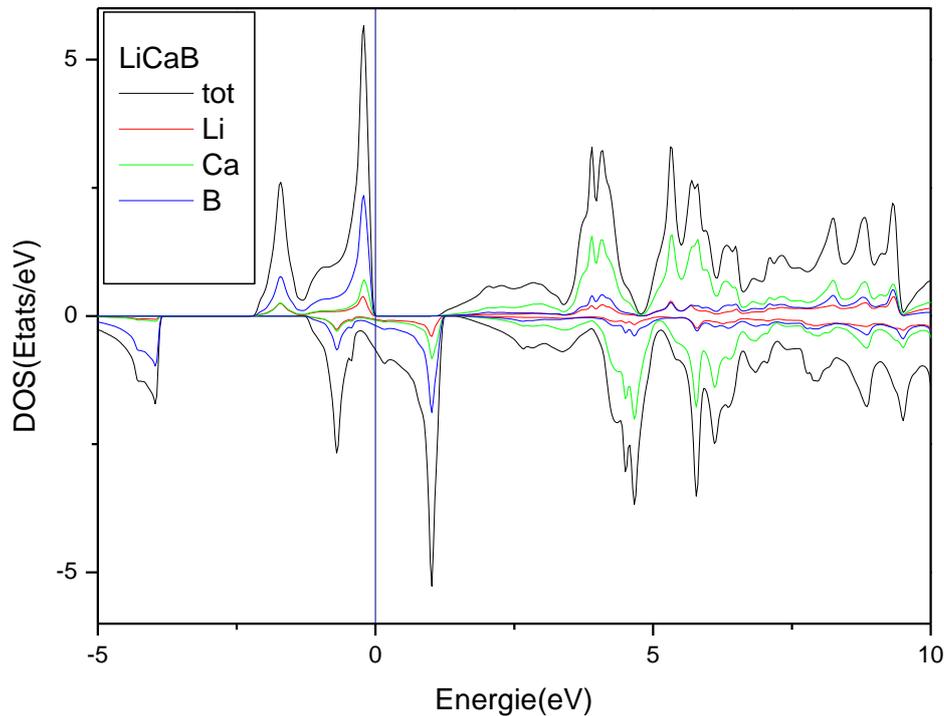


Figure (II.3) : Densité d'états électronique (dos) totale des composé LiCaB (phase α)

Afin de comprendre les différentes contributions atomiques à la structure de bande, la densité totale d'états DOS du composé semi heusler LiCaB est représentée sur les figures (II.3). D'après la figure (II.3), les états de spin-up du composé semi heusler LiCaB montrent un caractère semi-conducteur tandis que les états de spin-down montrent une nature métallique. L'alliage LiCaB est donc un semi-métal. Le moment magnétique total est de $-1.99 \mu_B$ pour l'alliage LiCaB (voir le tableau II.3). Cette valeur du moment magnétique est plus proche des valeurs précédemment rapportées .

Les moments magnétiques individuels des atomes de Li, Ca et B sont $0.13 \mu\text{B}$, $0.20 \mu\text{B}$ et de $0,87\mu\text{B}$ respectivement. La contribution maximale au moment magnétique total provient des atomes de B.

II.3.3) Propriété Magnétique :

Composé	M_T	M_{Li}	M_{Ca}	M_{B}	$M_{\text{interstitiel}}$
LiCaB	1.99909	0.13467	0.20325	0.87016	0.79102
	2.0 [13]	0.266	0.328	1.318	0.088
	2.00 [12]	0.264	0.327	1.319	0.087

Tableau (II.3) : les moments magnétique partiels, interstitiels et totaux du composé LiCaB.

II.4) Effet de pression :

Le paramètre de maille en fonction de la pression est donnée par la formule suivante :

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

dans le tableau II.4, nous avons présenté le moment magnétique en fonction de la pression dans une gamme de 10 GPa à 50 GPa

Pression	10	20	30	40	50
Moment Magnétique	2.00001	1.99998	2.00063	1.99945	1.98598

Tableau (II.4) : Moment magnétique en fonction de la pression

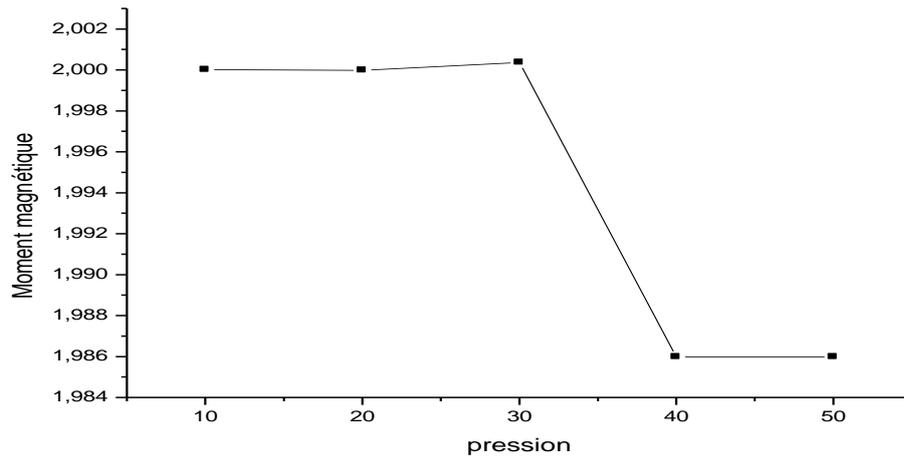


Figure (II.4) :une courbe graphique représentant les changements de la valeur de pression à un moment magnétique

Le graphique exprime le rapport de pression variable par rapport au moment magnétique, ou l'on note la valeur de pression (p) est de 2 dans l'intervalle de 10 à 30 GPa puis décroît jusqu'à ce que le moment magnétique atteigne une valeur de 1.98 entre la pression 40 Gpa et 50 Gpa. Ce qui montre que la pression influe sur le moment magnétique.

II.5) Conclusion :

Dans notre étude, nous avons appliqué le code de calcul ab initio WIEN2k, basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), on a utilisé la méthode de (FP-LAPW) Pour étudier les propriétés structurales, la stabilité des phases, les propriétés électroniques et les propriétés magnétiques. Anisi que l'effet du la pression sur le moment magnétique du composé Semi-Heusler LiCaB

Les principaux résultats obtenus lors de ce travail sont :

- Les valeurs de paramètres de maille(a) dans l'état d'équilibre sont en bon accord avec les données expérimentales.
- Le composés LiCaB est stables dans la phase α .
- LiCaB est un semi-métal ferromagnétique avec un moment magnétique de **-1.99 μB** .
- L'effet du la pression est remarquée sur le moment magnétique après la pression 40 GPa

L'objectif de cette étude et les résultats obtenus nous encouragent à étudier et découvrir d'autres composés des semi-heusler avec des bonnes propriétés

Référence :

- [1] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Letts.* 50, 2024-2027 (1983).
- [2] G. Y. Gao, K. L. Yao, E. Sasioglu, L. M. Sandratskii, Z. L. Liu and J. L. Jiang, *Phys. Rev. B* 75, 174442-174448 (2007).
- [3] G.Y. Gao, K.L. Yao, Z.L. Liu, J.L. Jiang, L.H. Yu and Y.L. Shi, *J. Phys.: Condens. Matter.*19, 315222-315230 (2007).
- [4] C.W. Zhang, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41, 085006 (2008).
- [5] Jun Chen, G. Y .Gao, K. L. Yao and M .H. Song, *J.Alloys and Compounds* 509, 10172-10178 (2011)
- [6] G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöstedt, et L. Nordström, *Phys. Rev. B*, vol. 64, p. 195134, 2001.
- [7] P. Blaha *et al.*, *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties.* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2018.
- [8] K. M. Wong, S. M. Alay-e-Abbas, A. Shaukat, et Y. FangandLei, *J. Appl. Phys.*, vol. 113, p. 014304, 2013.
- [9] A.E. Carlsson, A. Zunger, D.M. Wood, Electronic structure of LiZnN: Interstitial insertion rule, *Physical Review B: Condensed Matter* 32 (1985) 1386–1389.
- [10] T. Gruhn, Comparative ab initio study of half-Heusler compounds for optoelectronic applications, *Physical Review B: Condensed Matter* 82 (2010) 125210–125219.

[11] R. Umamaheswari, M. Yogeswari, G. Kalpana, Electronic properties and structural phase transition in $A_4 [M_4O_4]$ ($A^{1/4}$ Li, Na, K and Rb; $M^{1/4}$ Ag and Cu): A first principles study, Solid State Communications 155 (2013) 62–68.

[12] R .Umamaheswari, M .Yogeswari, G. Kalpana (Journal of Magnetism And Magnetic Materials) department of physique ,Annaba university, Sardar Patel Road ,G uindy,Chnnai 600 025, tanilnadu ,India

[13] Half metallic ferromagnetism in LiCaB ($A=$ Li, Na and K) compounds- DFT study

] R. Umamaheswari, M. Yogeswari, and G. Kalpana_ Kalpa@annaniv.edu

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Les alliages d'Heusler magnétiques forment une classe de matériaux les plus demandés pour les applications des dispositifs spintroniques, grâce à leur température de Curie élevée. La méthode *ab-initio* permet d'étudier et d'exploiter une grande gamme d'information sur ce type d'alliage.

En générale la famille des ces alliages se compose en deux grands catégories: les demi- Heusler ou Half-Heusler et Full- Heusler, selon plusieurs structures cristallographiques et ordres magnétiques.

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarités à Potentiel Total (FP-LAPW) implémentée dans le code WIEN2k en employant l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour déterminer les propriétés structurales comme le paramètre de maille, le module de compressibilité et sa première dérivée de l'alliages semi Heusler LiCaB. Les propriétés électroniques, magnétiques ont été aussi étudiées dans ce mémoire .

Les résultats obtenus à l'étude des propriétés structurales de ces alliages ont montré que le paramètre de réseau et le module de compressibilité pour les composés parents LiCaB sont généralement comparables avec des valeurs trouvées par d'autres travaux. Et pour leurs alliages, il n'existe pas d'autres travaux pour faire la comparaison.

A partir des calculs effectués, nous avons trouvé pour notre composés LiCaB que la structure la plus stable est la phase type α .

Les propriétés électroniques montrent que le composé LiCaB présentent un caractère demi métallique pour les deux directions de spin majoritaire *up* avec un moment magnétique de 1.99.les résultats montrent aussi que la pression influe sur le moment magnétique.