



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة - تيسمسيلت -

كلية العلوم والتكنولوجيا

قسم : علوم المادة

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر الأكاديمي

مجال: علوم المادة

التخصص: نانو فيزياء

تقديم الطالبين: عماني إبراهيم/ ريان حنان

الموضوع

دراسة الخصائص الفيزيائية لمركبات هسلر الرباعية ذات

قاعدة الكوبالت (CoRuZrSi, CoRuZrSn)

نوقشت يوم : 04 جوان 2023

أمام اللجنة المكونة من:

الإسم واللقب	الصفة	الرتبة	الجامعة
بن عالية صلاح الدين	رئيس	أستاذ التعليم العالي	جامعة تيسمسيلت
مختاري محمد	مشرف	أستاذ محاضر قسم أ	جامعة تيسمسيلت
دحمان فتح الله	ممتحن	أستاذ التعليم العالي	جامعة تيسمسيلت
لعزيزي محمد	مساعد مشرف	طالب دكتوراه	جامعة تيسمسيلت

السنة الدراسية: 2023/2022

# كلمة شكر

الحمد لله حمد الشاكرين وأصلي وأسلم وأبارك على عبده ورسوله سيدنا ونبينا محمد صلى الله عليه وسلم. لا يسعنا وقد أنهينا مذكرتنا هذه إلا أن نسجد لله سبحانه وتعالى شكرا وامتنانا على ما أفاء به علينا من نعم كثيرة لا تعد ولا تحصى ومنها نعمة التزود بالعلم وتوفيقنا في هذا العمل ونسأله أن يجعل عملنا خالصا لوجهه الكريم.

روي الإمام الترمذي عن أبي سعيد قال: قال رسول الله صلى الله عليه وسلم: "من لم يشكر الناس لم يشكر الله". وانطلاقا من هذا الحديث الشريف نتقدم بالشكر والتقدير: إلى الأستاذ المشرف "مخطاري محمد" الذي احتضن الدراسة ويسر لنا كل السبل لإتمامها بفضل توجيهاته القيمة.

ونخص بالشكر الأستاذ لعزيزي محمد الذي كان له بالغ الفضل والجهد والتوجيه في كل مرحلة من مراحل هذا العمل والذي ساهم في إنجاحه.

كما يطيب لنا خالص الشكر وبالغ التقدير إلى أعضاء لجنة المناقشة، على تفضلهم بقبول مناقشة مذكرتنا الأستاذ دحمان فتح الله والأستاذ بن عالية صلاح الدين، نسأل الله لهم التوفيق الدائم.

إقرارا منا بالفضل واعترافا بالجميل نتقدم بجزيل الشكر إلى كل من مد لنا يد العون وساندنا أثناء إجراء هذه الدراسة.

وفي الختام نشكر كل من أسدى لنا توجيهها أو نصحا أو أسعفنا بمعلومة أو مرجع و الحمد لله من قبل ومن بعد.

شكرا

## إهداء

إلى صاحب السيرة العطرة والفكر المستنير، فلقد كان  
له الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي والدي الحبيب  
أطال الله في عمره.  
إلى من وضعتني على طريق الحياة وجعلتني ربط الجأش، وراعتني  
حتى صرت كبيرة أُمي الغالية حفظها الله وجزاها كل خير.  
إلى إخوتي من كان لهم بالغ الأثر في كثير من العقبات والصعاب.  
إلى جميع أساتذتي الكرام، ممن لم يتوانوا في مد يد العون  
لي، إلى كل من كان له أثر في حياتي سلمي أو إيجابي.  
أهدي لكم عملي هذا سائلة الله أن ينفعنا به  
ويمدنا بتوفيقه.

ريان حنان

عماني إبراهيم

## الفهرس

01.....	المقدمة العامة
<b>I. الفصل الأول: عموميات حول سبائك هسلر (Les Alliages d'Heusler)</b>	
05.....	1.1. مقدمة
05.....	2.1. سبائك هسلر (les Alliages d'Heusler)
06.....	3.1. الأنواع المختلفة لسبائك هسلر
07.....	1.3.1. سبائك هسلر العكسية (Alliages d'Heusler inverses)
08.....	2.3.1. سبائك هسلر الرباعية (Alliages Heusler quaternaires)
19.....	3.3.1. سبائك هسلر الكاملة (Les Composés Full-Heusler)
10.....	4.3.1. سبائك نصف هسلر (Half-Heusler)
10.....	5.1. الخصائص البنيوية (Les propriétés Structurelles)
10.....	1.5.1. التركيب البلوري لسبائك هسلر
11.....	2.5.1. التركيب البلوري لسبائك نصف هسلر
13.....	6.1. الخصائص الإلكترونية
13.....	1.6.1. بنية النطاق (Structure de bande)
14.....	2.6.1. كثافة الحالات الإلكترونية (Densité d'états électronique)
15.....	7.1. الخصائص المغناطيسية
16.....	1.7.1. النفاذية المغناطيسية (Diamagnétisme)
16.....	2.7.1. البارامغناطيسية (Paramagnétisme)

17.....	3.7.I	المغناطيسية الحديدية (Ferromagnétisme)
18.....	4.7.I	المغناطيسية المضادة (Antiferromagnétique)
18.....	5.7.I	المغناطيسية الحديدية المعوضة (Ferrimagnétique)
19....	6.7.I	قاعدة (Slater-Pauling)
19.....	8.I	مميزات و تطبيقات سبائك هسلر
20.....	1.8.I	المقاومة المغناطيسية العملاقة (La magnétoresistance géant GMR)
21.....	2.8.I	المقاومة المغناطيسية للنفق (La magnétoresistance tunnel TMR)
22.....	9.I	خاتمة

## II. الفصل الثاني: نظرية دالة الكثافة (DFT)

27.....	1.II	المقدمة
27.....	2.II	معادلة شرودينجر (Schrödinger)
28.....	1.2.II	تقريب بورن أوبنهايمر (Born-Oppenheimer)
29.....	2.2.II	تقريب هارترى-فوك (Hartree - Fock)
30.....	3.2.II	نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT)
30.....	4.2.II	نظرية هوهنبارغ-كوهن (Hohenberg et Kohn)
31.....	5.2.II	معادلات كوهن-شام (Kohn-Sham)
33.....	6.2.II	تقريب الكثافة المحلية (LDA)
34.....	7.2.II	تقريب التدرج المعمم (GGA)
34.....	8.2.II	تعديل بيك وجونسون (mBJ)
35.....	3.II	طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية (FP-LAPW)

35.....	1.3.II	طريقة الموجة المستوية المعززة (APW)
37.....	2.3.II	طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا LAPW
38.....	3.3.II	برنامج Wien2K
40.....	1.3.3.II	استخدامات برنامج Wien2K
41.....	4.III	الخاتمة
<b>III. الفصل الثالث: النتائج والمناقشة</b>		
45.....	1.III	المقدمة
45.....	2.III	طريقة الحساب
46.....	3.III	الخصائص البنيوية للمركبين (Z=Si, Sn) CoRuZrZ
46.....	1.3.III	البنية البلورية للمركبين CoRuZrSi, CoRuZrSn
50.....	4.III	الخصائص الالكترونية للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn
50.....	1.4.III	عصابة الطاقة للمركبين CoRuZrZ (Z=Si,Sn)
53.....	2.4.III	فجوة الطاقة للمركبين CoRuZrZ (Z=Si, Sn)
54.....	3.4.III	كثافة الحالات الالكترونية CoRuZrZ (Z=Si,Sn)
56.....	5.III	الخصائص المغناطيسية للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn
56.....	1.5.III	العزم المغناطيسي
58.....	7.III	الخاتمة
62.....		الخاتمة العامة

## قائمة الأشكال والمنحنيات

الصفحة	العنوان	الرقم
06	توزيع العناصر المكونة لسبائك هسلر .	الشكل I. 1
06	هيكل بلوري مكعب لمركب هسلر .	الشكل I. 2
08	هيكلين من سبائك هسلر ذو القاعدة Mn يعتمدان على موضع العنصر Y.	الشكل I. 3
09	مركب رباعي هسلر (Quaternaire Heusler)	الشكل I. 4
11	مختلف أنواع الهياكل لسبائك كامل هسلر .	الشكل I. 5
12	الهيكل البلوري لسبيكة نصف هسلر من نوع XYZ.	الشكل I. 6
14	رسم تخطيطي للهيكل الإلكتروني للمواد (a معدن b) نصف معدن (c) أشباه الموصلات (d) عازل.	الشكل I. 7
16	(a) تغير المجال المغناطيسي للمغنطة، (b) الاختلاف الحراري للقابلية المغناطيسية لمادة مغناطيسية	الشكل I. 8
16	البارامغناطيسية لذرات حرة.	الشكل I. 9
17	المغناطيسية الحديدية (a) شبكة الدوران (b) التباين الحراري (c) الاختلاف الحراري للمغنطة التلقائية.	الشكل I. 10
18	المغناطيسية المضادة (a): شبكة الدوران (b): المغنطة كدالة للمجال المغناطيسي للإثارة $M(H)$ , (c) القابلية للتأثر كدالة لدرجة الحرارة $\chi(T)$ .	الشكل I. 11
21	مبدأ عمل المقاومة المغناطيسية العملاقة (GMR)	الشكل I. 12
22	الحالتان المتوازيتان والمتضادتان في تقاطع نفق مغناطيسي	الشكل I. 13
33	خوارزمية حل معادلة كوهن-شام.	الشكل II. 1
36	شكل كمون MT	الشكل II. 2
40	بنية برنامج Wien2K	الشكل II. 3
47	البنية البلورية للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn للنوع: $(Cu_2MnAl)$	الشكل III. 1
47	البنية البلورية للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn للنوع: Hg <sub>2</sub> CuTi	الشكل III. 2
48	تغيرات الطاقة الكمية للمركبين: (أ) CoRuZrSi، (ب) CoRuZrSn بدلالة الحجم	الشكل III. 3
51	عصابة الطاقة للمركب CoRuZrSi للنوع $Cu_2MnAl$ في الحالة الفيرومغناطيسية (FM) محسوبة في التقريبات GGA و mBJ	الشكل III. 4

52	عصابة الطاقة للمركب CoRuZrSn للنوع Cu <sub>2</sub> MnAl في الحالة الفيرومغناطيسية (FM) محسوبة في التقريبات mBJ و GGA .	الشكل 5.III
55	كثافة الحالات للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn محسوبة بطريقتي GGA و mBJ .	الشكل 6.III



## قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الرقم
07	يبرز مواقع للتركيبات المختلفة لمركبات هسلر	الجدول 1.I
12	يوضح المواقع الذرية لثلاث شبكات متداخلة fcc لهيكل نصف هسلر	الجدول 2.I
49	قيم كل من ثابت الشبكة $a$ (Å) و معامل الانضغاطية B (GPa) والمشتقة الاولى لمعامل الانضغاطية B' للمركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi	الجدول 1.III
53	قيم المانع الطاقى من أجل المركبين CoRuZrZ (Z= Si, Sn) في التقريبيين GGA و mBJ.	الجدول 2.III
57	يبين قيم العزم المغناطيسي الجزئي والكلية للمركبين CoRuZrZ (Z=Si, Sn)	الجدول 3.III

## قائمة الرموز

المؤثر الهاميلتوني	H
دالة الموجة	$\Psi$
الطاقة الكلية للنظام	E
الطاقة الحركية للإلكترونات	$T_e$
الطاقة الحركية للنوية	$T_n$
طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون	$V_{e-e}$
طاقة التفاعل إلكترون-نواة	$V_{e-n}$
طاقة التفاعل نواة-نواة	$V_{n-n}$
معاملات خاصة بالإلكترون	$i, i$
المسافة بين الإلكترونين $i$ و $j$	$\vec{r}_i - \vec{r}_j$
إحداثيات الانوية	R
إحداثيات الإلكترونات	R
الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية	$P_0$
الجهد الخارجي	$V_{ext}$
دالة هوهانبرغ-كوهن	$F(P)$
الطاقة الحركية للنظام الإلكتروني	$T[\rho(r)]$
طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون	$V_{e-e}$
الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة	$T_0$
كمون هارترى	$V_H$
كمون فعال	$V_{eff}$
طاقة الارتباط	$\epsilon_x$
طاقة التبادل	$\epsilon_c$
طاقة التبادل-ارتباط	$\epsilon_{xc}$
كثافة الإلكترونات	$\rho(r)$
تدرج الكثافة الإلكترونية	$\nabla\rho(r)$
كثافة الطاقة الحركية	$t_\sigma$
نصف قطر الكرة MT	$r_0$
حجم الخلية الأولية	$\Omega$

الدالة الهرمونية الكروية.	$Y_{lm}$
معاملات النشر	$C_G$
الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الشعاعي	$U_l$
المعاملات الموافقة للدالة $U_l$	$A_{lm}$
المعاملات المقابلة للدالة $U_l$	$B_{lm}$
ثابت الشبكة	$a(A^\circ)$
معامل الانضغاطية	$B$
المشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية	$B'$
نظرية دالة الكثافة	DFT
تقريب كثافة الموضع	LDA
تقريب التدرج المعمم	GGA
تقريب لبريك جونسون	mBJ
كثافة الحالة الالكترونية	DOS
طريقة الموجة المستوية المتزايدة	APW
طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل	FP-LAPW
برنامج حساب	Wien2K
أصغر نصف قطر للكرة MT	RMT
عدد نقاط K المستخدمة	K point
هيكل مكعب	CFC
مغناطيسية بوهر	$\mu_B$
الحالة الفيرومغناطيسية	FM
الحالة البارامغناطيسية	PM
حجم الشبكة	$V$
حجم الخلية في حالة التوازن	$V_0$
الدوران العالي	$\rho(E_F)\uparrow$
الدوران المنخفض	$\rho(E_F)\downarrow$

مقدمة عامة

## المقدمة العامة

خلال العقود الثلاث الماضية، مرت الإلكترونيات بتطور جذري. ولذلك تم تكريس الاهتمام لدمج المواد المغناطيسية في الأجهزة الإلكترونية المدمجة. الأساس هو حقيقة أن الإلكترون يدور بالإضافة إلى شحنته في سياق إلكترونيات الدوران، يتم التحكم في دوران الإلكترونات وليس فقط شحنتها الكهربائية في عملية نقل المعلومات في الدوائر. تم تطوير المواد المغناطيسية وأشباه الموصلات بشكل منفصل لفترة طويلة باستخدام المواد المغناطيسية المستخدمة بشكل أساسي لتخزين البيانات مثل محركات الأقراص الثابتة والأجهزة القائمة على أشباه الموصلات لمعالجة البيانات كما هو الحال في المعالجات.

يعد دمج فئتي المواد (المغناطيسية وأشباه الموصلات) من أجل تطوير تطبيقات spintronic تحديا كبيرا. فهي تجمع بين مزايا كل من المواد المغناطيسية وأشباه الموصلات لتكون متعددة الأطراف وسريعة. أدى إلى ظهور الجيل الأول من الأجهزة الإلكترونية المغزلية في شكل صمامات الدوران القائمة على الهياكل المغناطيسية متعددة الطبقات، تستخدم هذه الصمامات في رؤوس القراءة لغالبية وسائط تخزين المعلومات الصلبة (الأقراص الصلبة). الجيل الثاني من أجهزة spintronic التي تدمج المواد المغناطيسية وأشباه الموصلات سيسمح بمزيد من المرونة (ترانزستورات الدوران... الخ).

لن يكون هذا الجيل الثاني تحسينا بسيطا في قدرات الأجهزة المتوفرة حاليا، ولكنها ستجلب ميزات جديدة من شأنها السماح لأجهزة الكمبيوتر في المستقبل بأن تكون أسرع مع استهلاك طاقة أقل، وبالتالي لديها القدرة على إحداث ثورة في صناعة تكنولوجيا المعلومات بطريقة مشابهة لما تسبب في إدخال الترانزستور منذ عدة عقود. يوجد حاليا عدة طرق يتم استغلالها: أشباه الموصلات المغناطيسية المخففة (DMS) مثل:  $ZnO$  و  $Ga_{1-x}Mn_xAs$  مع عناصر منشطات أخرى، سبائك Heusler مثل:  $CoMnGa$  و  $NiMnSb$ ، أكاسيد معدنية شبه مغناطيسية مثل:  $CrO_2$  و  $Fe_3O_4$ . و بالتالي فإن تركيب هذه المواد بالإضافة إلى فهم خصائصها أمر ضروري لهذه المجالات الجديدة من حيث الاهتمام العلمي والتطبيقات الصناعية. جذبت أشباه المعادن المغناطيسية (HMFs) الانتباه لتطبيقاتها المحتملة في الإلكترونيات السينية. لديهم فجوة طاقة في اتجاه دوران واحد على مستوى فيرمي وطابع معدني لاتجاه الدوران الآخر. ينتج هذا عن استقطاب الدوران لإلكترونات التوصيل. بالنسبة ل MRAMs (ذاكرات الوصول العشوائي المغناطيسية) وأجهزة spintronic الأخرى.

المادة الأولى التي كان من المتوقع أن تكون شبه معدنية هي NiMnSb بواسطة De Groot و [1]al. يحتوي هذا المركب المعدني على هيكل بلوري خاص يسمى هيكل شبه هسلر (semi-Heusler). منذ ذلك الوقت، كانت عائلة سبائك هسلر موضوع العديد من الدراسات بهدف تصميم HMFs جديدة. ومنذ ذلك الحين تم الإبلاغ عن امتلاك عدد كبير من سبائك هسلر خصائص مثيرة للاهتمام. على سبيل المثال وجد Ishida et al أن إجمالي سبيكة هسلر (Z: Si, Ge)  $Co_2MnZ$  عبارة عن شبه معدن [1]. لاحقا أثار  $Mn_2Val, Co_2MnX$  (X: Si, Ge, Sn) و  $Ru_2MnZ$  (Z: Si, Ge, Sn, Sb) العديد من التحقيقات [2]. مؤخرا، أظهر  $Co_2CrAl$  و  $Co_2CrGa$  و  $Co_2FeSi$  طابع أشباه المعادن المغناطيسية HMFs وفقا لحسابات البنية الإلكترونية [3]. أيضا لوحظ وجود مقاومة مغناطيسية قوية للنفق (TMR) في غالبية تقاطعات الأنفاق المغناطيسية بناء على  $Co_2FeSi$  [4].

في هذا العمل نحن مهتمون بدراسة مركبين من مركبات هسلر الرباعية  $CoRuZrSi$  و  $CoRuZrSn$  من حيث الجوانب الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية، باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة والخطية (FP-LAPW) في إطار الكثافة الوظيفية (DFT) المطبقة في برنامج Wien2k. تتكون هذه المذكرة من ثلاث فصول:

الفصل الأول هو بحث نظري معمق حول مفاهيم سبائك هسلر والتركيبات المختلفة المعتمدة، وأخيرا تطبيقاتها التكنولوجية

كما تناولنا في الفصل الثاني معادلة شرودنغر والتقريبات المختلفة من بينها تقريب بورن اوبنهايمر و تقريب هاتري-فوك، وتطرقنا أيضا لنظرية دالة الكثافة (DFT) بتقريباتها: تقريب التدرج المعمم GGA، وتقريب المعدل لبريك جونسون mBJ.

أما الفصل الثالث فتناولنا فيه النتائج المحصل عليها والمتمثلة في الخصائص البنيوية (ثابت الشبكة  $a(A^\circ)$ ، معامل الانضغاطية B والمشتقة الأولى لهذا المعامل  $B'$ )، الخصائص الإلكترونية (بنية عصابة الطاقة، كثافة الحالات الكلية و الجزئية)، الخصائص المغناطيسية لهذه المركبات. وفي الأخير قمنا بتقديم خلاصة عامة لمختلف النتائج المحصل عليها.

المراجع

- [1] Fujii S, Sugimura S, Ishida S, Asano S, J Phys : Condens Matter 2-8 583 (1990).
- [2] Hongzhi Luo et al. Journal of Magnetism and magnetic Materials 230, 0241 – 428 (2008).
- [3] A. Kellow, N.E. Fenineche, T. Grosdidier, H. Aourag, C. Coddet, J. APPL. Phys. 94-3292 (2003).
- [4] T. Marukame et al. Appl. PHYS. Lett. 88, 262503 (2006).

## الفصل الأول

عموميات حول سبائك

(Généralités sur les هسلر

Alliages d'Heusler)



**1.1. مقدمة:**

تلقت سبائك هسلر (les Alliages d'Heusler) اهتماما علميا متجددا لأنه كان من المفترض أن تكون مرشحة جديدة للتطبيقات المستقبلية.

المركبات المعدنية ل هسلر هي مركبات مغناطيسية حديدية ثلاثية من الصيغة العامة  $(X_2YZ)$ ، اكتشفت لأول مرة من قبل المهندس الألماني فريديش هسلر (Heusler Friedrich) عام 1903. حيث درس السبيكة  $(Cu_2MnSb)$  وجدها تتصرف مثل مادة حديدية مغناطيسية ، على الرغم من أن العناصر المكونة لها ليست مواد مغناطيسية في حد ذاتها لأنها تظهر ممغنطة غير صفرية عند دمجها [1.2].

في عام 1963 تبين أن (Mn) يساهم بشكل أساسي في عزم الدوران المغناطيسي في هذه السبائك [3]. من المثير للاهتمام أن نلاحظ أن (Mn) النقي يقدم ترتيبا من النوع المغناطيسي المضاد. تعتمد الخصائص المغناطيسية لهسلر بشدة على التركيب البلوري لأن ترتيب الذرات بينها هو الذي يؤدي إلى نشوء المغناطيسية الحديدية. تعرف الآن باسم مركبات هسلر Heusler أو السبائك. وهي أشباه لموصلات الثلاثية أو المواد المعدنية مع خليط (1 : 1 : 1) يعرف أيضا باسم نصف هسلر (Half- Heusler) أو مقياس متكافئ 1 : 1 : 2 يعرف باسم كامل هسلر (Full- Heusler) [4].

**2.1. سبائك هسلر (les Alliages d'Heusler)**

مركبات هسلر هي مركبات ذات الصيغة الكيميائية  $X_2YZ$ . حيث أن العنصرين X و Y ينتميان للمعادن الانتقالية و Z هو عنصر من المجموعة III أو IV أو V من الجدول الدوري للعناصر [1]، لتمييزها عن كثير من المركبات بخاصية الدوران الإلكتروني [2.3]، والتي وجدت أيضا في حقل المواد المصنفة من رتبة النانو وبعض الجزيئات.

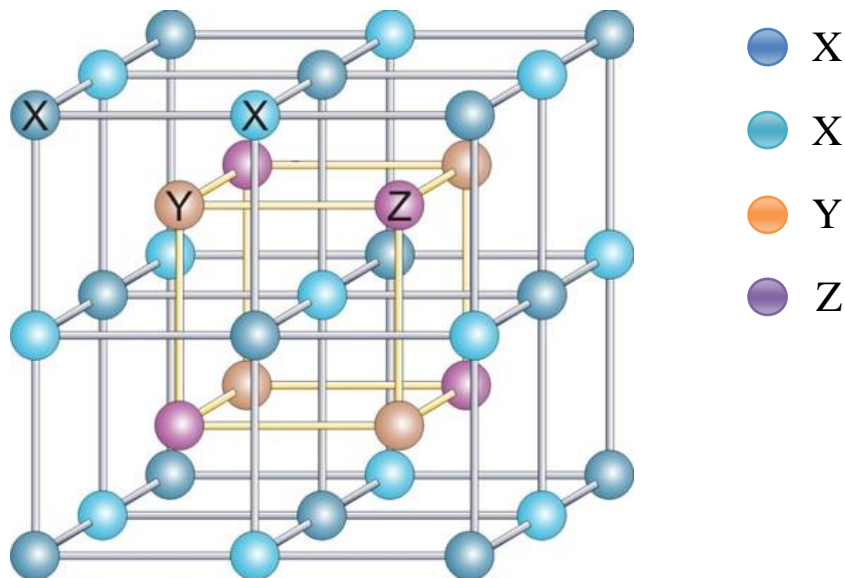
**X<sub>2</sub>YZ Heusler compounds**

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 1.68	In 1.76	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										

الشكل (1.I): توزيع العناصر المكونة لسبائك هسلر [4].

### 3.I. الأنواع المختلفة لسبائك هسلر

هناك عدة أنواع من سبائك هسلر كما في الجدول:



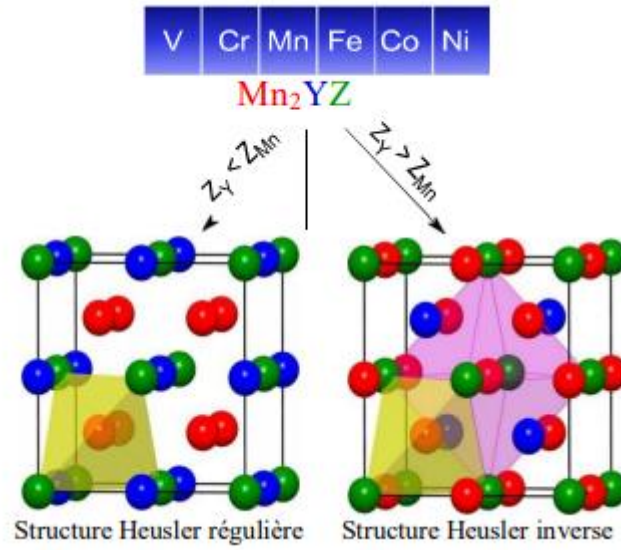
الشكل (2.I): هيكل بلوري مكعب لمركب هسلر [7].

الجدول (1.I): يبرز المواقع للتركيبات المختلفة لمركبات هسلر [7].

	A(0,0,0)	B(1/2,1/2,1/2)	C(1/4,1/4,1/4)	D(3/4,3/4,3/4)
نصف هسلر (Half-Heusler) ( $cl_b$ ): XYZ	X	Y	Z	
كامل هسلر (Full-Heusler) ( $L2_1$ ): $X_2YZ$	X	Y	X	Z
هسلر رباعي هسلر (Heusler quaternaires): $(XX')YZ$	X	Y	X'	Z
هسلر معكوس هسلر (Heusler inverses) $(XA): X_2YZ$	X	X	Y	Z

### 1.3.I سبائك هسلر العكسية (Alliages d'Heusler inverses)

تحمل سبائك هسلر المعكوسة الصيغة  $(X_2YZ)$ . حيث يكون تكافؤ ذرة المعدن الانتقالي X أصغر من Y. نتيجة لذلك تتبلور مركبات هسلر المعكوسة في الهيكل المعروف باسم XA أو Xa حيث يتشكل تسلسل الذرات X-X-Y-Z والنموذج الأولي هو  $Hg_2TiCu$  [6]. تمت دراسة العديد من مركبات هسلر المعكوسة باستخدام حسابات البنية الإلكترونية من المبدأ الأول [8.9]. في كل الحالات فإن بنية XA مفضلة بقوة على بنية  $L2_1$  لمركبات كامل هسلر (Full-Heusler) المعتادة حيث يكون تسلسل الذرات هو X-Y-X-Z. تم تأكيد هذا الأخير أيضا من خلال التجارب على  $Mn_2CoSn$  و  $Mn_2CoGa$  بالإضافة إلى عينات  $Mn_3Ga$  [10.11]، لكن التجارب على  $Mn_2NiSb$  تكشف أن الترتيب الفعلي للذرات في المواقع المختلفة يمكن أن يتأثر بطريقة التحضير [1,2]. أصبحت سبائك هسلر العكسية أكثر إثارة للاهتمام منذ استخدامهم باستعمال أشباه الموصلات مع درجات حرارة كوري الكبيرة التي يمكن أن تتجاوز 1000 درجة كلفن كما في الحالة  $Cr_2CoGa$  [1,3]. تم تحديد العديد من المركبات على أنها مغناطيسية شبه معدنية. يرتبط ظهور شبه المعدنية في جميع الحالات بسلوك Slater-Pauling (إجمالي عزم الدوران المغناطيسي).

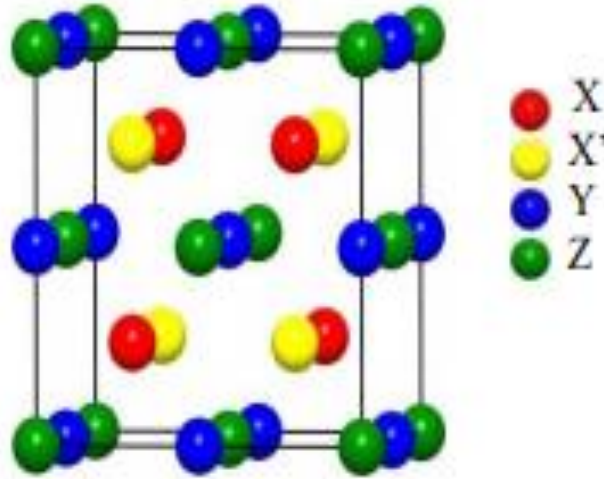


الشكل (3.I): هيكلين من سبائك هسلر ذو القاعدة Mn يعتمدان على موضع العنصر Y [14.15].

### 2.3.I. سبائك هسلر الرباعية (Alliages Heusler quaternaires)

توجد عائلة أخرى لسبائك هسلر من نوع LiMgPdSn وتتبلور في مجموعة الفضاء المكعبة (F-43m). تعرف أيضا باسم مركبات هسلر من النوع [16] LiMgPdSb تدعى هسلر الرباعية. وهي المركبات الرباعية للصيغة الكيميائية  $(XX')YZ$  حيث  $X$  و  $X'$  و  $Y$  هي ذرات المعادن الانتقالية. تكافئ  $X'$  أقل من تكافئ  $X$ ، وتكافئ العنصر  $Y$  أقل من تكافئ  $X$  و  $X'$ . تسلسل الذرات على طول قطري المكعب المتمركز الوجه هو  $X-Y-X'-Z$  وهو الأكثر استقرارا من الناحية النشطة [17].

العناصر  $X, X', Y, Z$  تحتل المواقع الذرية  $4a(0.0.0)$ ،  $4b(1/2, 1/2, 1/2)$ ،  $4c(1/4, 1/4, 1/4)$ ،  $4d(3/4, 3/4, 3/4)$  على التوالي. الرسم التوضيحي في الشكل (I.4) يوضح ذلك.



الشكل (4.I): مركب رباعي هسلر (Quaternaire Heusler) [18].

### 3.3.I. سبائك هسلر الكاملة (Les Composés Full-Heusler)

المجموعة الثالثة من سبائك هسلر هي ذات الصيغة العامة  $X_2YZ$  ومعها قياس العناصر المتكافئة 1:1:2 والتي تعرف غالباً باسم هسلر الكامل Full-Heusler. تتبلور في المجموعة الفضائية المكعبة ( $Fm-3m$  المجموعة الفضائية رقم 225) مع نموذج أولي  $Cu_2MnAl$ . في هذا النموذج الأولي تشغل ذرات X الموضع  $8C(1/4, 1/4, 1/4)$  وتقع ذرات Y و Z في الموضع  $4a(0.0.0)$  و  $4b(1/2, 1/2, 1/2)$  على التوالي. يتكون هيكل  $L2_1$  من أربعة شرائح فرعية متداخلة fcc، حيث تشغل ذرة X اثنتان منها. في هذه الحالة تشكل العناصر (Y قليلة الكهروإيجابية) والعناصر (Z الكهروإيجابية) بنية شبيهة بـ NaCl، والتي تشغل مواقع (octadrique) بينما مواقع (tétradiques) محجوزة لذرات X التي تشكل هيكل ZnS. البنية  $L2_1$  موضحة في الشكل (4.I) يمكن اعتبارها بنية فوقية لـ CsCl، إذا تم إزاحة حواف خلايا وحدة سبيكة هسلر بمقدار  $(1/4, 1/4, 1/4)$ . فيما يتعلق بخلية  $Fm-3m$ .

يمكننا القول أن الجمع بين خليتين ثنائيتين لهيكل CsCl يشكل مركب كامل هسلر Full-

[19] Heusler

**4.3.I. سبائك نصف هسلر (Half-Heusler)**

يرتبط التركيب الكيميائي لشكل XYZ بسبائك نصف هسلر (Half-Heusler) والتي يمكن اعتبارها مركبات مكونة من جزأين مختلفين، أحدهما يسمى التساهمية والآخر أيوني. الذرات X و Y لها طابع كاتيوني مختلف، من ناحية أخرى يعرف Z على أنه المكافئ الأنيوني [20].

بطريقة عشوائية أو بترتيب أبجدي يمكن الانتقال إلى فرز العناصر وفقا لكهروسلبيتها. أخيرا، من الممكن العثور على التباديل الثلاثية في بداية الصيغة. نجد العنصر الأكثر كهروإيجابية قادما من مجموعة رئيسية، معدن انتقالي أو عنصر أرضي نادر، بينما في نهاية الصيغة نجد العنصر الأكثر كهروسلبية. يأتي هذا أيضا من عنصر رئيسي المجموعة ولكن فقط من نصف الجدول الدوري.

**5.I. الخصائص البنيوية: ( Les propriétés Structurales )****5.1.I. التركيب البلوري لسبائك هسلر**

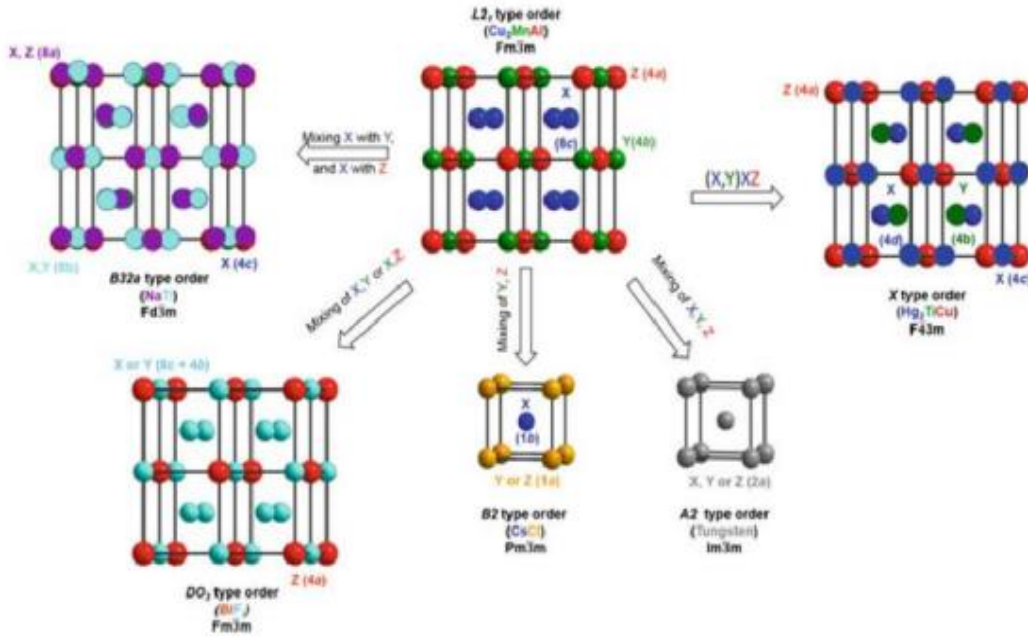
سبائك هسلر الكاملة هي مركبات ثلاثية الفلزات ذات تركيبية متكافئة (X<sub>2</sub>YZ) [21.22]. حيث X و Y عناصر معدنية انتقالية و Z عبارة عن مجموعة (العنصر الثالث أو الرابع أو الخامس). تتبلور هذه المركبات في هيكل المكعب.

تم العثور على مركبات هسلر الكاملة إما في النوع (Hg<sub>2</sub>CuTi) المشار إليه (النوع X) الذي ينتمي إلى التناظر ((F43-3m) مجموعة الفضاء رقم [23]216). أو في النوع (Cu<sub>2</sub>MnAl) المشار إليه (النوع L<sub>21</sub>). عندما يكون عدد إلكترونات التكافؤ للعنصر X أكبر من رقم العنصر Y، يأخذ المركب البنية (النوع L<sub>21</sub>) [24.25]. بينما يقال أن البنية (النوع X) مفضلة في الحالة المعاكسة [26]. خلية الوحدة ل (النوع L<sub>21</sub>) تتكون البنية التي تنتمي إلى تناظر ((Fm-3m) مجموعة الفضاء رقم [27.82] (225) من تداخل أربعة شرائح فرعية مكعبة متمركزة على الوجه:

$$X_1=(0.0.0), X_2=(1/2,1/2,1/2), Y=(1/4,1/4,1/4), Z=(3/4,3/4,3/4)$$

بالنسبة ل (النوع X)، حيث يتم تبادل معلمات المهنة للعنصرين (X<sub>2</sub>) و (Y) لمركبات هسلر الكاملة مع هيكل النموذج الأولي اللاحق تسمى أيضا معكوس هسلر.

إذا لم تكن الذرات X متكافئة فإنها تنتج سبائك هسلر الثلاثية والرباعية. سبائك هسلر الرباعية مع تركيبة متكافئة من  $(XX'YZ)$  تتبلور عادة ك (نوع)  $-LiMgPdSn$  هيكل هسلر يشار إليه (النوع Y) والذي ينتمي إلى التناظر  $(F43-m)$  مجموعة الفضاء رقم 216 [29.30.31]. تحتوي خلية الوحدة للهيكل (النوع Y) على مواضع ويكوف (Wyckoff) التالية:  $X=(1/2,1/2,1/2)$ ،  $X'=(0.0.0)$ ،  $Z(3/4,3/4,3/4)$ ،  $Y=(1/4,1/4,1/4)$ .



الشكل (5.I): مختلف أنواع الهياكل لسبائك كامل هسلر [7].

## 2.5.I التركيب البلوري لسبائك نصف هسلر

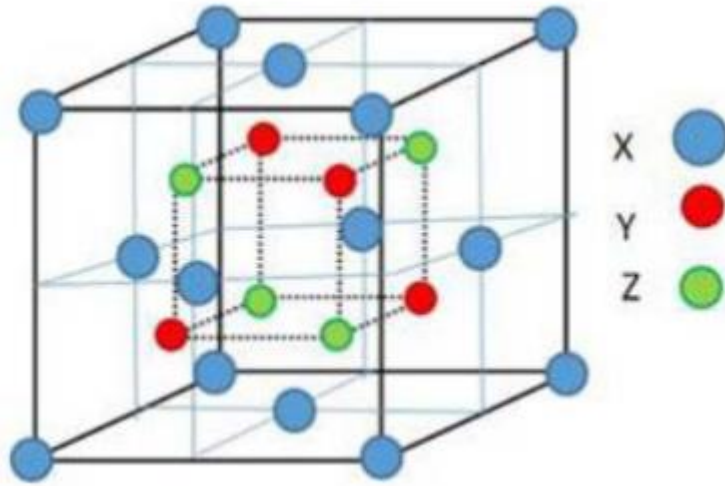
سبائك نصف هسلر الثلاثية  $(XYZ)$  مرتبة بقياس متكافئ 1:1:1 تتبلور في الهيكل المكعب مع النموذج الأولي C1b ( $MgAgAs$ ) مجموعة الفضاء رقم 216). والتي يمكن اشتقاقها من مزيج من هيكل الزنك الرباعي السطوح و بنية نوع المزج وهيكل نوع الملح الصخري (الشكل 6.I).

يتكون هيكل نصف هسلر من ثلاث شبكات فرعية متداخلة fcc تشغلها العناصر X و Y و Z على التوالي. يمكن لهذه العناصر أن تملأ المواضع الذرية في ثلاثة ترتيبات مختلفة من النوع [31].

**الجدول (2.I):** يوضح المواقع الذرية لثلاث شبكات متداخلة fcc لهيكل نصف هسلر [32].

	X	Y	Z
النوع (1)	(0,0,0)	(1/2,1/2,1/2)	(1/4,1/4,1/4)
النوع (2)	(1/2,1/2,1/2)	(1/4,1/4,1/4)	(0,0,0)
النوع (3)	(1/4,1/4,1/4)	(0,0,0)	(1/2,1/2,1/2)

الوظيفة (3/4,3/4,3/4) شاغرة لهذا النوع من المركبات.



**الشكل (6.I):** الهيكل البلوري لسبيكة نصف هسلر من نوع XYZ [34].

## 6.I الخصائص الإلكترونية

تسمح لنا دراسة هذه الخصائص للمادة بتحليل و فهم كيفية ارتباط العناصر المختلفة لهذه المادة، ويتم ذلك ضمن كثافة الحالات الإلكترونية (DOS) و هيكل النطاق.

تعتمد خصائص مركبات (XYZ) بشدة على عدد إلكترونات التكافؤ (Nv). في عام 1970 وجد Jeitschko [36] أن إلكترونات التكافؤ تحدد بنية النطاق وبالتالي فهي مسؤولة عن الخصائص

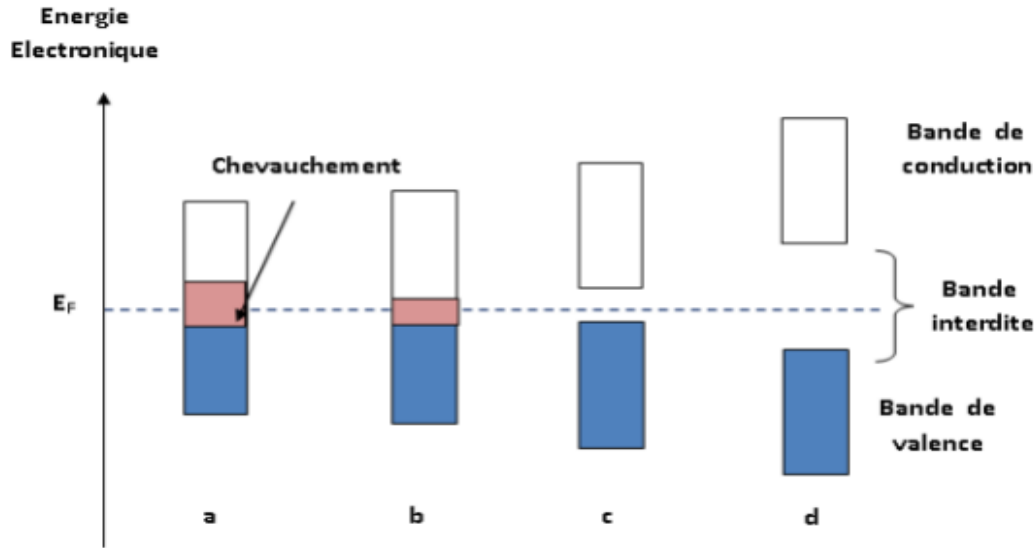


الفيزيائية لهذه الأنواع من المركبات. تم اعتبار المركبات ذات  $Nv=21$  أو  $22$  مثل  $NiMnSb$  بمثابة معادن شبه مغناطيسية حديدية [37]. بينما المركبات ذات  $Nv=20$  غير مستقرة بسبب توطين مستوى فارمي (Fermi) لحالات منطقة منع الارتباط [38]. تعتبر المركبات التي تحتوي على  $Nv=18$  أشباه موصلات نصف معدنية أو شبه موصلة بشكل غير عادي.

### 1.6.I. بنية النطاق (Structure de bande)

يتم شرح السلوك العازل أو الموصل كهربائياً للمادة بواسطة نظرية النطاق، والتي تسمح بنمذجة قيم الطاقة التي يمكن أن تأخذها الإلكترونات من مادة صلبة بداخلها.

بشكل عام، هذه الإلكترونات لديها إمكانية أخذ قيم الطاقة المدرجة في فترات معينة فقط، والتي يتم فصلها بواسطة نطاقات طاقة محظورة. تؤدي هذه النمذجة إلى الحديث عن نطاقات الطاقة أو بنية النطاق. تعطي نطاقات الطاقة حالات الطاقة الممكنة للإلكترونات وفقاً إلى متجه الموجة. ولذلك يتم تمثيلهم في الفضاء المتبادل وفي اتجاهات التناظرات الأعلى لمنطقة بريلوان الأولى. يحدد نطاق التكافؤ، وهو النطاق الأدنى ونطاق التوصيل الأعلى، المفصول بواسطة النطاق الممنوع بشكل أساسي خصائص نقل الإلكترونات داخل المادة [49].



الشكل (7.I): رسم تخطيطي للهيكل الإلكتروني للمواد (a) معدن (b) نصف معدن (c) أشباه الموصلات (d) عازل [35].

## 2.6.I. كثافة الحالات الإلكترونية (Densité d'états électronique)

كثافة الحالات الإلكترونية (DOS) تعطي معلومات عن تطور مستويات الطاقة والكثافة المرتبطة بها وفقاً للتكوين (تغيير الهيكل، تباين الطاقة المدارية، الخ ...) من المادة.

توفر الكثافة الإجمالية للحالات DOS الوصول إلى خصائص التوصيل الإلكتروني للمادة. علاوة على ذلك، بالنسبة لكل ذرة، نحدد مجالاً بنصف قطر معين نعرض بداخله كثافة الإلكترون على التوافقية الكروية من النوع s أو p أو d أو f. وبالتالي نحصل على الكثافة الجزئية للحالات التي تجعل من الممكن تحديد بنية الروابط الكيميائية بين ذرات بلورة أو جزيء. تعتمد إسقاطات الكثافة الإجمالية للحالات على أنصاف أقطار المجالات التي تُسقط عليها الكثافات الجزئية للحالات، وبالتالي تتيح فقط الوصول إلى المعلومات النوعية [50].

**7.I. الخصائص المغناطيسية:**

المواد المغناطيسية لها أهمية تكنولوجية كبيرة، وذلك بفضل ثرائها الكبير في السلوك. علاوة على ذلك، تحتل المغناطيسية مكانا مهما في وصف الخصائص الأساسية للمادة [41].

بالنسبة لبعض الذرات فإن العزم المغناطيسي الذري غير صفري. وهكذا تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي فإن العزم المغناطيسي لهذه الذرات سوف تتحرك في اتجاه المجال المطبق [42]، تسمى هذه الظاهرة بارامغناطيسية.

في الصورة الكوكبية للذرة، تخضع العناصر لحركتين: ثورة حول النواة تتوافق مع العزم المداري وأخرى على نفسها تتوافق معها لحظة الدوران. فقط الأصداف غير المكتملة لها لحظات  $L \rightarrow$  مدارية و  $S \rightarrow$  غير صفري. تنتج الخصائص المغناطيسية للمركبات من التفاعلات المرتبطة بكل ذرة مغناطيسية. وفقا لميكانيك الكم، تتم كتابة العزم المغناطيسي الكلي (مجموع العزوم المغناطيسية المدارية والدورانية):

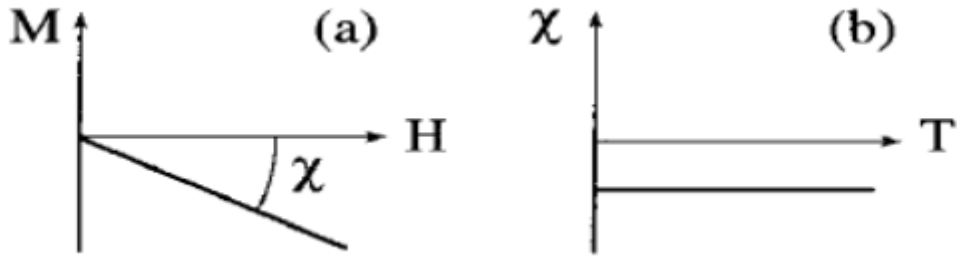
$$\vec{m} = \vec{m}_0 + \vec{m}_s = -\mu_B \vec{L} - 2\mu_B \vec{S} \quad \dots \dots \dots (1.I)$$

حيث:  $\mu_B$  هي مغناطيسية بوهر.

**1.7.I. النفاذية المغناطيسية (Diamagnétisme)**

وهي تميز المواد التي تشتمل على ذرات غير مغناطيسية فقط ومغناطيسيتها التي يسببها المجال ضعيفة للغاية ومعاكسة لهذا الأخير. تظل القابلية المغناطيسية مستقلة عمليا عن المجال ودرجة الحرارة، فهي سالبة بترتيب  $10^{-5}$ .

تنشأ النفاذية المغناطيسية بتعديل الحركة المدارية للإلكترونات تحت تأثير المجال المطبق. وفقا لقانون لينز، تؤدي التيارات المستحثة إلى تحريضي يعارض تباين المجال المطبق. توجد نفاذية مغناطيسية قوية جدا في المواد فائقة التوصيل مع حساسية تساوي (-1).

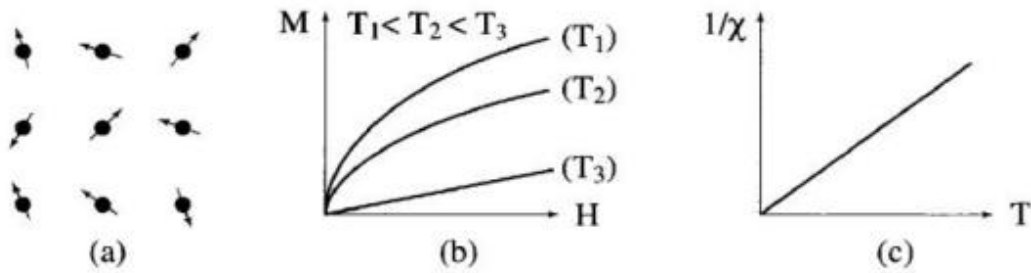


الشكل (8.I): (a) تغير المجال المغناطيسي للمغنطة. (b) الاختلاف الحراري للقابلية

المغناطيسية لمادة مغناطيسية [43].

### 2.7.I البارامغناطيسية (Paramagnétisme)

إنها تأتي من عزوم مغناطيسية دائمة تحملها كل الذرات أو جزء منها. هذه العزوم لا تتفاعل مع بعضها البعض ويمكن أن تتجه بحرية في أي اتجاه. بدون تأثير المجال المغناطيسي، يتم تعديل متوسط قيمة اتجاه العزم ويظهر مغناطيس مستحث متوازي. يتم تعديل هذه المغنطة بشكل أكبر و يظهر مغنطة مستحاثية متوازية. هذا التمهنت هو الأضعف لأن درجة الحرارة مرتفعة. مع ارتفاع درجة الحرارة، أي أن التحريض الحراري يصبح مهما فإن اختلافات المغنطة وفقا للحقل خطية أكثر فأكثر. يتم تحديد القابلية الأولية الإيجابية عند الصفر المطلق و تتناقص مع زيادة درجة الحرارة. هو عموما حوالي  $10^{-3}$  إلى  $10^{-5}$  في درجة حرارة الغرفة. في الحالة المثالية يختلف معكوس القابلية الأولية بشكل متناسب مع درجة الحرارة، هذه هي درجة حرارة كوري [44].



الشكل (9.I): البارامغناطيسية لذرات حرة [45].

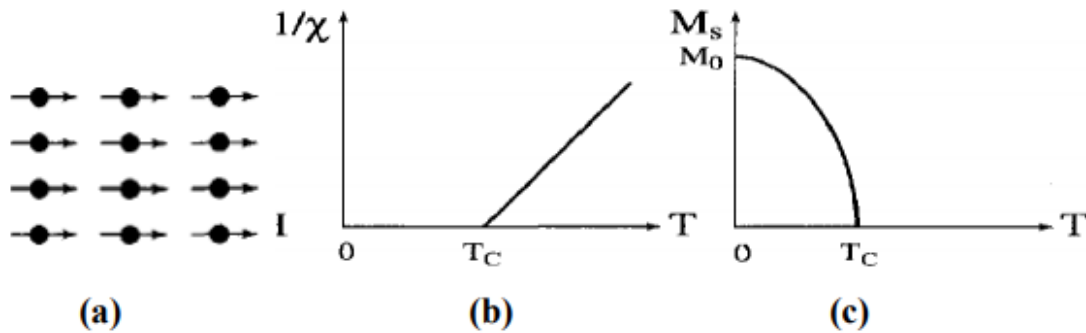
## 3.7.I. المغناطيسية الحديدية (Ferromagnétisme)

المغناطيسية الحديدية هي الخاصية التي تمتلكها بعض الأجسام لكونها ممغنطة بشدة تحت تأثير مجال مغناطيسي خارجي، وبالنسبة لبعض (المغناطيسيات، المواد المغناطيسية الصلبة) تحافظ على المغناطيسية حتى بعد اختفاء المجال الخارجي. هذه الخاصية ناتجة عن الاقتران الجماعي للدوران بين المراكز المعدنية لمادة أو لمجموعة من المعادن الانتقالية، حيث يتم توجيه عزم جميع الدورات بنفس الطريقة داخل نفس مجال Weiss. مادة مغناطيسية حديدية مغمورة في مجال مغناطيسي تولد حقلًا مغناطيسيًا جديدًا بداخلها، هذه الظاهرة تسمى ممغنطة. يضاف المجال الناتج عن الممغنطة إلى الحقل الأولي و يكون مجموع كل منهما هو الذي يتم ملاحظته. في هذه الحالة، يشير مصطلح المجال المغناطيسي إلى الحقل الكلي ويأخذ المجال الأولي اسم مجال الإثارة المغناطيسية.

للتمييز بين المجالات المختلفة، يتم الإشارة إلى الإثارة المغناطيسية H والمجال الكلي B، وترتبط ببعضها البعض بالعلاقة التالية:

$$B = \mu_0 (H + M) \dots \dots \dots (2.I)$$

مع  $\mu_0$  النفاذية المغناطيسية للفراغ و M ممغنطة الوسط.



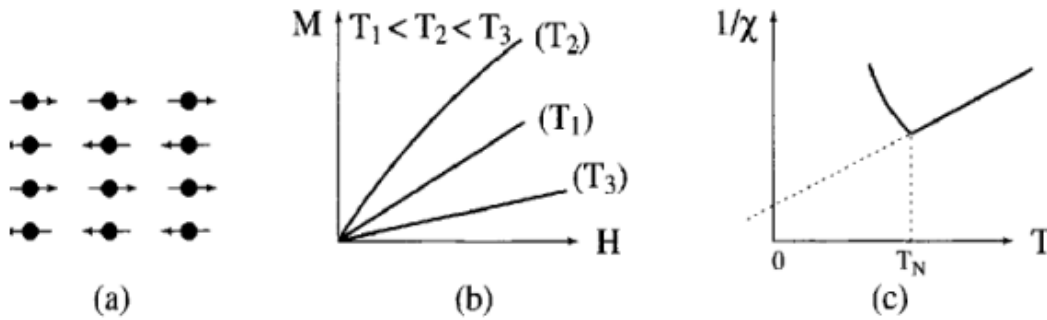
الشكل (10.I): المغناطيسية الحديدية [45].

(a) شبكة الدوران (b) التباين الحراري (c) الاختلاف الحراري للممغنطة التلقائية.

### 4.7.I. المغناطيسية المضادة (Antiferromagnétique)

في الجسم المضاد للمغناطيسية، تقابل أدنى حالة طاقة محاذاة عكسية موازية للعزم المغناطيسي. ينتج عن هذا تجميع عزوم في شبكتين فرعيتين من مغنطة متساوية ومعاكسة بحيث في حالة عدم وجود حقل تكون المغنطة الكلية صفر [46]. الاختلاف الحراري للقابلية للمغناطيسية لها حد أقصى يتوافق مع درجة حرارة معينة، مماثلة لدرجة حرارة كوري للمغناطيسيات الحديدية، تسمى درجة حرارة Néel  $T_N$ . وفوق درجة الحرارة هذه تصبح المادة المضادة للمغناطيسية بارامغناطيسية [47].

لقد قدمنا هنا أبسط حالة للمغناطيسية المضادة، تتكون من شبكتين فرعيتين متوازيتين. يوجد في الواقع العديد من المواد المضادة للمغناطيسية التي لها هياكل مغناطيسية أكثر تعقيدا ولا سيما المواد غير المترابطة.



الشكل (11.I): المغناطيسية المضادة (a): شبكة الدوران (b): المغنطة كدالة للمجال المغناطيسي

للإثارة  $M(H)$ , (c): القابلية للتأثر كدالة لدرجة الحرارة  $\chi(T)$  [45].

### 5.7.I. المغناطيسية الحديدية المعوضة (Ferrimagnétique)

هذه حالة أكثر دقة، ناتجة عن اتجاه بعض الذرات لتوجيه نفسها بشكل مضاد متوازي (معظم أكاسيد الحديد مغناطيسية) [48].

أكسب اكتشاف هذه الحالة لويس نيل جائزة نوبل في عام 1970. يتم ترتيب الذرات المغناطيسية في شبكتين فرعيتين (جميعها متوازية داخل نفس الشبكة الفرعية، ومضادة للتوازي من شبكة فرعية إلى أخرى).

**6.7.I. قاعدة سلاتر-بولين (Slater-Pauling)**

في حالة المعادن الانتقالية وسبائكها، تتوسع الذرات في مستويات الطاقة الذرية ثلاثية الأبعاد و4s لتشكيل بنية نطاق أو كثافة الحالات من النطاق d، تكون أكبر من النطاق s بالقرب من مستوى فيرمي [49.50.51]. بسبب هذه الفجوة، يجب أن يكون عدد الحالات المحتلة عددا صحيحا، وهو ما تم تأكيده بالضبط للحالة  $m=N_v-6$  [48]. يمكن أن تؤدي هذه القاعدة إلى قيم غير صحيحة إذا كان متوسط تركيز إلكترون التكافؤ ليس عددا صحيحا. وبالتالي، غالبا ما يكون استخدام عدد إلكترونات التكافؤ لكل وحدة أكثر ملائمة. تعطى قاعدة Slater-pauling بالعلاقة:

$$m_{xyz}=N_v-18 \dots\dots\dots (3.I)$$

في حالة سبائك هسلر ( $X_2YZ$ ) هناك أربع ذرات لكل خلية تؤدي إلى الصيغة:

$$m_{X_2YZ}=N_v-24 \dots\dots\dots (4.I)$$

**8.I. ميزات و تطبيقات سبائك هسلر**

في العقود الأخيرة، كانت سبائك هسلر ذات أهمية كبيرة للتطبيقات المختلفة والتي يمكن تفسيرها من خلال خصائصها المختلفة والتي هي مناسبة تماما للأجهزة Spintronic. إحدى الخصائص التي ساهمت في هذا الاهتمام المتزايد بهذه السبائك هي طابعها شبه المعدني. في عام 2002، جالاناكيس (Galanakis) وآخرون [52.53]. تتبأ بأن سبائك كامل هسلر هي أيضا نصف معدنية. في الواقع هذه الميزة الجوهرية تسلط الضوء عليها كمادة واحدة لصناعة الأجهزة الإلكترونية، حيث تستغل هذه الأجهزة خصائص المقاومة المغناطيسية العملاقة لتجمعات محددة من هذه المواد. بما في ذلك ما يسمى بصمام الدوران والذي يستخدم على نطاق واسع في الصناعة. هذا هو ما يسمح لرؤساء محركات الأقراص الثابتة اليوم بالأداء الجيد.

في هذه الحالة، يتم نقل التيار عن طريق قناتين: قناة واحدة للإلكترونات تدور للأعلى والأخرى قناة الدوران للأسفل. بالنسبة للموصل الكلاسيكي، تكون هذه القنوات متشابهة ولكن في مادة القناة الأخرى للقنوات التي تدور للأسفل، بالنسبة للموصل الكلاسيكي تكون هذه القنوات متشابهة ولكن في مادة

مغناطيسية حديدية. على العكس من ذلك هناك فرق واضح بين الاثنين، اعتماداً على كثافة الحالة على مستوى فيرمي. وبالتالي في الحالة التي تكون فيها المادة شبه معدنية يتم ضمان التوصيل بواسطة قناة واحدة فقط وتكون الأخرى عازلة.

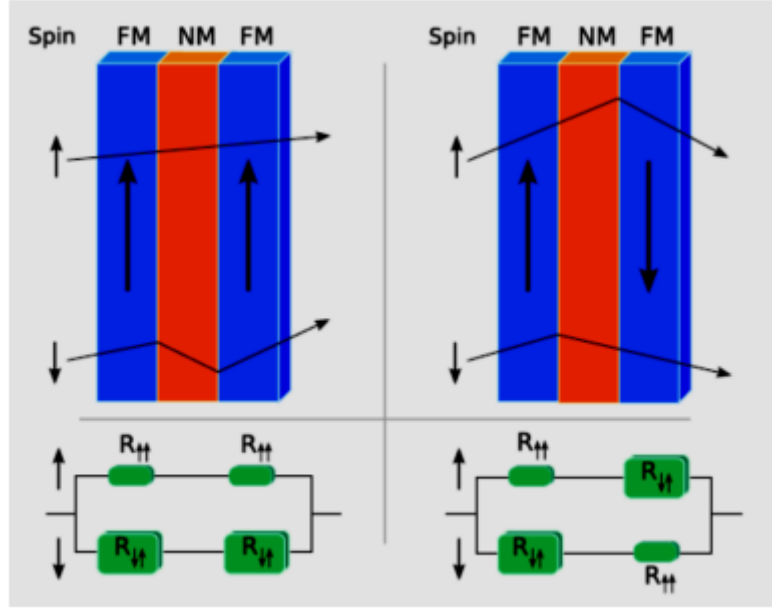
الميزة الأساسية الأخرى لسبائك هسلر هي درجة حرارة كوري (Température de Curie) العالية خاصة في مركبات كامل هسلر. يمكن تفسير ذلك من خلال اقتران قوي بين ذرات الأنواع المختلفة التي تشكل السبيكة، وهنا تأتي حقيقة أن كامل هسلر التي لا تحتوي شبكتها على موقع شاغر. تظهر درجات حرارة كوري أعلى من نصف هسلر. على سبيل المثال، في سبيكة  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  تم تحديد درجة حرارة كوري تساوي 985 درجة كلفن، بينما في سبيكة  $\text{Co}_2\text{FeGa}$  أعلى من 1100 درجة كلفن [54].

على عكس شبه المعادن الأخرى مثل أكسيد الحديد الأسود ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ )، التي تكون درجة حرارة كوري فيها قريبة من درجة حرارة الغرفة، فإن درجة حرارة كوري العالية لسبائك هسلر تجعلها أكثر إثارة للاهتمام من وجهة نظر فنية، الاستقرار الحراري للتطبيقات في spintronic المناسب للأجهزة تمت إزالتها. تظهر هذه الخاصية التي تسمى ذاكرة الشكل المغناطيسي، على سبيل المثال في المركب  $\text{NiMnGa}$  والتي يمكن أن تصل 9% تشوه في ظل تطبيق مجال ضعيف نسبياً.

### 1.8.I المقاومة المغناطيسية العملاقة (La magnétoristance géant GMR)

تم عرض المقاومة المغناطيسية العملاقة بشكل تجريبي في عام 1988 في أكوام من طبقات من الحديد والكروم [55،56]. يتجلى ذلك من خلال تباين المقاومة الكهربائية للنظام اعتماداً على اتجاهات المغناطيسات المختلفة لكل طبقة من الطبقات المعدنية متعددة الطبقات. يتم فصل الطبقات المغناطيسية الحديدية بواسطة طبقات موصل غير مغناطيسية مثل  $\text{Fe}$  و  $\text{Cr}$ . في الواقع، هناك تكوينان محتملان يتعلقان بهذا النوع من المكس في التكوين مع طبقات مغنطة متوازية حيث يكون اتجاه المغنطة متطابقاً في كلتا الطبقتين المغناطيسيتين، فإن غالبية إلكترونات الدوران تمر عبر الهيكل بسهولة دون المرور بحدث الانتشار، وهذا يعني ضمناً حالة من المقاومة المنخفضة.





الشكل (12.I): مبدأ عمل المقاومة المغناطيسية العملاقة (GMR) [57].

### 2.8.I. المقاومة المغناطيسية للنفق (La magnétoristance tunnel TMR)

تم وصف ظاهرة أخرى لأول مرة من خلال ملاحظة Jullière في عام 1975، في تقاطع النوع المعدني في (المعادن / العوازل) في كل من Fe/Ge/Co [58]، هذا الأخير لاحظ إشارة مقاومة نفق مغناطيسي تبلغ 14% عند درجة حرارة منخفضة. لتفسير هذه الظاهرة طور جولبير نموذجاً قائماً على فرضيتين مستوحاة من عمل أسلافه، في الأولى أن هناك حفظاً للدوران الإلكتروني أثناء النقل النفقي. بينما يوضح الثاني أن التوصيل يعتمد لكل تكوين مغناطيسي، بشكل مباشر على كثافة الحالات الإلكترونية للأقطاب الكهربائية وتيار النفق، في كل قناة يتناسب مع ناتج الكثافات الحالة عند مستوى فيرمي في القطبين لاتجاه الدوران المقابل. تقاطع النفق المغناطيسي هو عبارة عن بنية مغايرة مكونة من طبقة عازلة رقيقة يبلغ سمكها بضعة نانومترات، وعادة ما تكون MgO أو الألمنيوم محصورة بين طبقتين مغناطيسيتين معدنيتين وتعتبر بمثابة حاجز يسمح بنقل الإلكترونات بالتأثير النفقي [59].



الشكل (13.I): الحالتان المتوازيتان والمتضادتان في تقاطع نفق مغناطيسي [60].

## 9.I الخاتمة

لقد حددنا في هذا الفصل سبائك هسلر بمجموعة دراسات لخصائصها المختلفة، حيث تقدم مجالاً واسعاً للغاية و تبقى دائماً في تطور بفضل مزاياها العديدة وإسهاماتها التي يمكن استخدامها في التقنيات الجديدة وتطبيقاتها في عدة قطاعات.

دراسة سبائك هسلر هي فكرة حديثة جداً مقارنة بعدد التوقعات النظرية والتحليلات التجريبية الموجودة في الأدبيات. وقد بدأت بعد أكثر من 100 عام من اكتشاف هذه السبائك. نحن مهتمون بالدراسة النظرية لسبائك هسلر التي يمكن أن تكون نصف معدنية مغناطيسية حديدية، والتي لها خصوصية الامتثال لقاعدة Slater-pouling، حيث يمكن أن يكون لديهم أقصى استقطاب دوران (من 100%)، تظهر هذه الخصائص المثيرة للاهتمام بسبائك هسلر في مجال الإلكترونيات السفلية والإلكترونيات الضوئية التي لا تزال موضوعاً للموضوعية والابتكار.

## المراجع

- [1] K.M.Wong, S.M.Alay\_e\_Abbas, A.Shaukat, Y.Fang and Y.Lei, J.Appl.Phys.113, 014304 (2013).+
- [2] K.M.Wong, S.M.Alay\_e\_Abbas, A.Shaukat, Y.Fang and Y.Lei, J.Appl.Phys.114, 034901 (2013).
- [3] S.Savrasov and D. Savrasov , « Full-potential Linear Muffin-Tin-Orbital Method for Calculating Total Energies and Forces », Physical Review B, Vol.46,pp.2181\_2195(1992).
- [4] S. Y. Savrasov, Phys. Rev.B54, 16470(1996).
- [5] S.A.Wolf, D.D.Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S.von Molnar, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, Science 294 (2001) 1488.
- [6] J.H. Park,E.Voscovo, H.J. Kim, C. Know, R. Ramesh, T. Venkatesh, Nature 392 (1998) 794.
- [7] C. Fesler, H.Atsufumi. Heusler Alloys Properties, Growth, Applications. Springer Series in Materials Science 222 (2016).
- [8] K.Zdogan, u I. Galanakis, J. Magan. Magan. Master. 321, L34 (2009).
- [9] E. Bayar, N. Kervan, S. Kervan, J. Magan. Master. 323, 2945 (2011).
- [10] J. Winterlik, G.H. fecher, B. Balke, T. Graf, V. Alijani, V. Ksenofontov, C.A. Jenkins, O. Meshcheriakova, C. Felser, G. Luis, S. Ueda, K. Kobayashi, T. Nakamura, M. W\_\_jcik, Phys. Rev. B 83, 174448 (2011).
- [11] V. Alijani, J. Winterlik, G.H. Fecher, C. Felser, Appl. Phys. Lett. 99, 222510 (2012)
- [12] H. Luo, W. Zhu, L. Ma, G. Liu, Y. Li, X. Zhu, C. Jiang, H. Xu, G. Wu, J. Phys. D. Appl.Phys. 42, 095001 (2009).
- [13] I. Galanakis, E. Saüsöoglu, ùAppl. Phys. Lett. 99,052509 (2011). 23
- [14] V. V. Surikov, V. N. Zhordochkin, T. Y. Astakhova, Hyperfine Interact 59 (1990) 469.
- [15] N. Lakshami, A. Pandey, K. Vugopalan, Bull Master Sci 25 (2002) 309.
- [16] D. Xu, G. LUI, G. H. Fecher, C. Felser, Y. Li, H. Liu, J. Appl. Phys. 105, 07E901 (2009).
- [17] V. Alijani, J. Winterlik, G.H. Fecher, S.S. Naghavi, C. felser, Phys. Rev. B 83, 184428 (2011).
- [18] C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, Angew Chem Int Ed 46 (2007) 668.
- [19] W. H. Butler, C. K. A. Mewes, C. Liu, T. Xu, arXiv : vol 1 (2011) 3855.

- [20] H. ZENASHI, « Etude théorique des propriétés magnétiques, électroniques et structurales des Alliages Heusler », Université de Abou Bakebelkaid, Telemcen, (2013).
- [21] F. Heusler, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 5, 219 (1903).
- [22] O. Heusler. Ann. Phys. 155 :411, (1934).
- [23] M. Pusej and Z. Ban. Croat. Chem. Acta, 41 :79, (1969).
- [24] Ahmadian, F. J. Supercond. Nov. Magan. 26, 1737-1743 (2013).
- [25] Fr. Heusler, Z. Anorg. Allg. Chem. 161,159-160, (1927).
- [26] N. Tezuka, N. Ikeda, F. Mitsuhashi and S. Sugimoto. Appl. Phys. Lett., 94 :162504, (2009).
- [27] J. Drews, U. Eberz, H. Schuster, J. Less-Common. Met. 116, 27 (1986).
- [28] X. Dai, G. Liu, G.H.Fecher, C.Felser, Y.Li, H.Liu, J. Appl. Phys. 105, 07E901 (2009).
- [29] U. Eberz, W. Seelentag, and H. U. Schuster, Z.Naturforsch. B, 35 :1341, (1980).
- [30] H. ABBASSA. « Contributon à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [31] H. Nowotny and W. Sibert, J.Z. Metallkunde, 33, pp. 391-394 (1941).
- [32] W. Wunderlich, X.Motoyama. Mater. Re. Soc. Symp. Proc, 1129, 1128-U01-10 (2009).
- [33] G.X Dai, G. H. Liu, C.Felser, Y. Felser, H. Li, Liu, J. Appl. Phys. 105, 07E901 (2009).
- [34] M. W. MOHAMEDI, « Etude ab-initio des propriétés structurales, élastiques, thermiques, électroniques, et magnétique des alliages Heusler quaternaires CoMnCrZ (Z=Al, As, Si, Ge) » Université de SIDI BEL ABBES, Thèse (2018).
- [35] S. DENIDNI, « propriétés structurales, électroniques, et magnétique de l'état fondamentale des alliages halfHeusler » Université MOHAMED BOUDIAF-MSILA, Thèse (2021).
- [36] W. Jeitschko. Met. Trans, 1, 3159-3162 (1970).
- [37] R.A.deGroot, F.M.Muller, P. G.van Engen, and K.H.J.Buschow. Phys. Rev.Lett.,50, 2024(1983).
- [38] J.R.Sootsman, D.Y.Chung, and M.G.Kanatzidis. Angew. Chem, 48(46), 8616- 8639, (2009).
- [39] Henry Mathieu, physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod, ISBN 2. 10 005654 9, paris, 2001.
- [40] D. Sanchez-Portal, E. Artacho and J. L. Soler, (1995) Solid State Comm. 95, 685.
- [41] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou. Origin and properties of the gap in the half-ferromagnetic heusler alloys. Phys. Rev. B, 66 :134428, 2002.
- [42] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou. Slater-Pauling behavior and origin of the half-métallicity of the full-Heusler alloys. Phys. Rev. B, 66 :174429, 2002.

- [43] P. J. Brown, K. U. Neumann, P. J. Webster, and K. R. A. Ziebeck. The magnetization distributions in some Heusler alloys proposed as half-metallic ferromagnets. *Journal of physics : Condensed Matter*, 12 :1827, 2000.
- [44] M. Gerlet J. B. Issi, *Traité des Matériaux volume 8, Physique des Matériaux*, Presses Polytechniques et Universitaires Rpmantes (1997).
- [45] S. BOUZIANE, « « Etude des propriétés structurales, électroniques et thermoélectrique de l'alliage full- Heusler  $Fe_2Val$  », Université Ibn Khaldoun-Tiaret, Thèse (2021).
- [46] S. I. Tomonaga, university of Chicago press, 1997. ISBN 0-226-80794-0 (1997).
- [47] N. H. Duc, T. D. Hien, D. Givord, J. J. M. Franse, and S. Sinnema. *J. Magan. Mater.* 70 (1987) 313.
- [48] H. ZENASHI, « Etude théorique des propriétés magnétique électronique et structureles des alliages Heusler », Université de Tlemcen, Thèse (2013).
- [49] P. Gruberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, H. Sowers, *Phys. Rev. Lett* 57(1986)2442.
- [50] J. Slater, *phys. Rev*, 49, pp. 537-545(1936).
- [51] Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, and U. Mizutani, *Phys. Rev. Lett*, 79, pp. 1909-1912 (1997).
- [52] 38 Richard L. Martin, *op. cit.*, p.479.
- [53] L. Hedin and B. I. Lundqvist. *J. Phys. C* 4, 2064 (1980).
- [54] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, D. J. Singh, C. Fiolhais, *Phys. Rev. B* 48, 4978(1993).
- [55] O. HERNANDEZ, , Université Toulouse, France, Thèse (2013).
- [56] R. A. De Groot and F. M. Mueller, *Phys. Rev. Lett*, vol. 50, no. 25, pp. 2024–2027, Jun. (1983).
- [57] Wikimedia commons, <http://commons.wikimedia.org>.
- [58] M. M. Kirillova, A. A. Makhnev, E. I. Shreder, V. P. Dyakina, and N. B. Gorina, *Phys. Status. Solidi*, B187, pp. 231-240 (1995).
- [59] M. N. Bibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, *Phys Rev Let* 61(1988) 2472.
- [60] BELKHOUANE Mohammed Etude de premier principe des propriétés Structurales, électroniques et magnétiques des matériaux Heusler de type  $Fe_2MnZ$  ( $Z = Al, Si$ )  $Fe_2MnAl_{0.5}Si_{0.5}$  ». Thèse de Doctorat en Sciences Physiques, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, Algérie 2016.

## الفصل الثاني

### نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT)

**1.II. المقدمة:**

وصف المادة يعني معرفة خصائصها الإلكترونية، والبنوية والبصرية وما إلى ذلك، والتي تعكس التفاعلات بين الجسيمات التي تتكون منها (الإلكترونات والنوى). يعتمد هذا بشكل أساسي على حل معادلة شرودينغر، التي تصف بدقة الحالة الثابتة للإلكترونات والنواة الذرية. حل هذه المعادلة صعب لأنه لا يوجد تعبير تحليلي للإمكانات البلورية، وهذا يؤدي إلى تعقيد كبير في حساب بنية النطاق.

نحن مضطرون لعمل تقديرات تقريبية لإيجاد حلول. من خلال استخدام المحاكاة، في السنوات الأخيرة تم اقتراح العديد من النماذج النظرية لتفسير قياسات التجارب، للتعويض بالتأثيرات الجديدة وتصميم مواد جديدة من حساب التفاضل والتكامل بالمبادئ الأولى أو (ab-initio).

**2.II. معادلة شرودينغر (Schrödinger):**

في الدراسات الكمية للنظام الكوانتي تعتبر معادلة شرودينغر هي الأساس، حيث أعطت صيغ ديراك المجردة إطاراً دقيقاً لميكانيك موجات شرودينغر. تتكون جميع المواد من إلكترونات وأنوية. تعتمد الخصائص العيانية للمادة فقط على موقع هذه الإلكترونات والأنوية وبالتالي، فإن معرفة نوع الذرات التي تتكون منها المادة وخصائصها البلورية فقط هي من حيث المبدأ كافية لحساب دالة الموجة والطاقة باستخدام معادلة شرودينغر بشكل مستقل عن الزمن:

$$\mathbf{H} \psi (\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi (\mathbf{R}, \mathbf{r}) \dots \dots \dots (1.II)$$

حيث:

**H:** المؤثر الهاملتوني

**Ψ:** دالة الموجة

**E:** الطاقة الكلية للنظام

**R:** احداثيات الانوية

**r:** احداثيات الإلكترونات

هاميلتون النظام الكلي عبارة عن مجموع الطاقة الحركية لكل الجسيمات وطاقة التفاعل بينها، وفي غياب التفاعل مع الحقل الخارجي، نكتب:

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}_e + \mathbf{T}_n + \mathbf{V}_e-e + \mathbf{V}_e-n + \mathbf{V}_n-n \dots \dots \dots (2.II)$$

حيث:

$$\hat{T}_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{R}_i}{M_n} \quad \text{الطاقة الحركية للأنوية}$$

$$\hat{T}_e = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{m_e} \quad \text{الطاقة الحركية للإلكترونات}$$

$$\hat{V}_{n-e} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{طاقة التفاعل نواة-إلكترون}$$

$$\hat{V}_{e-e} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{طاقة التفاعل إلكترون-إلكترون}$$

$$\hat{V}_{n-n} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad \text{طاقة التفاعل نواة-نواة}$$

يمكن إيجاد حلول لهذه المعادلة المستقلة عن الزمن بدقة في حالة أنظمة الهيدروجين فقط، بينما في حالة نظام متعدد الإلكترونات وبسبب التفاعلات الإلكترونية الكثيرة بين الجسيمات المكونة للنظام فإنه لا يوجد حل دقيق لمعادلة شرودينغر، لذلك وضعت عدة تقريبات لتبسيط هذه المعادلة سننتقل إلى البعض منها:

### 1.2.II. تقريب بورن أوبنهايمر (Born-Oppenheimer)

إن تقريب بورن أوبنهايمر [1] هو أول ما يتم استخدامه لحل معادلة شرودينغر. حيث يتم إهمال حركة الأنوية مقارنة بحركة الإلكترونات، وبالتالي يتم إهمال الطاقة الحركية  $T_n$  للنواة. نظراً لأنه من المفترض أن تكون الأنوية ثابتة في وضع توازنها، فإن هذا يبسط بشكل كبير معادلة شرودينغر. بالنظر إلى هذا التقريب يتم كتابة الهاميلتوني الكلي:

$$\hat{H}_T = \hat{T}_e + \hat{V}_{n-e} + \hat{V}_{e-e} \dots \dots \dots (3.II)$$

هذه الأخيرة لا يمكن حلها بالطرق الرياضية المعروفة لذلك نستخدم تقريب آخر يسمى تقريب هارترى-فوك، يستخدم هذا الأخير بكثرة في الكيمياء الكمية لدراسة الجزيئات والذرات.



## 2.2.II. تقريب هارترى-فوك (Hartree - Fock):

يعتمد تقريب هارترى [2] على نموذج الإلكترونات المستقل أي أن كل إلكترون يتحرك بشكل منفرد ومستقل في حقل متوسط متولد عن الأنوية وباقي الإلكترونات الأخرى. أي يتغير لدينا المشكل من عدد كبير من الإلكترونات إلى إلكترون وحيد. وبالتالي يصبح من الممكن وصف الدالة الموجية للنظام الإلكتروني بجاء مباشر لدوال الأحادية الإلكترونية فنكتب:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \dots \Psi_N(r_N) \dots \dots \dots (4. II)$$

في عام 1930 بين فوك [3] أن الدالة الموجية لهارترى لا تحترم مبدأ استبعاد باولي Pauli فقام بتحسين نموذج هارترى بتطبيق مبدأ :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_n) = -\Psi(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_n) \dots \dots \dots (5. II)$$

وهكذا بتطبيق كل التبادلات نحصل على n! حد لنفس النوع. فتصبح الدالة الموجة هي مجموع كل الحدود مع الأخذ بعين الاعتبار الإشارتين (+) و (-) لتصبح بشكل محدد يسمى "محدد سالتر"

$$\Psi(1 \dots \dots \dots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(r_1) & \Psi_1(r_1) & \Psi_N(r_1) \\ \Psi_1(r_2) & \Psi_2(r_2) & \Psi_N(r_2) \\ \Psi_1(r_N) & \Psi_N(r_N) & \Psi_N(r_N) \end{vmatrix} \dots \dots \dots (6. II)$$

حيث:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \text{ ثابت التعامد}$$

وتصبح معادلة شرودينغر:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_N(r) + V_H(r) \right] \Psi_i(r) - \sum_i \left[ \frac{dr^3}{r-r'} \Psi_i^*(r') \Psi_i(r') \right] \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r) \dots \dots \dots (II.7)$$

باستخدام هذا التقريب يصبح الحساب ثقيلًا نوعًا ما، بالإضافة إلى أنه غير دقيق، ففي الواقع يهمل تقريب هارترى-فوك تفاعلًا كميًا هامًا وهو طاقة الارتباطات بين الإلكترونات ذات السبينات المتعاكسة. فمن بين الصعوبات التي تصادف حساب بنية عصابات الطاقة هو تحديد الكمون داخل البلورة [4].

هناك بديل واعد للغاية للتغلب على هذه الصعوبات وهي طريقة جد عملية تعرف بنظرية الدالة الوظيفية للكثافة.

### 3.2.II. نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT):

تاريخيًا، يعود أصل نظرية الدالة الوظيفية للكثافة DFT [5] ل عمل توماس وفيرمي [6.7] في أواخر العشرينات، وفي منتصف الستينات أسس كوهنبارغ-كوهن وشام [8] الشكلية النظرية التي تستند إليها الطريقة الحالية.

إن نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) هي إعادة صياغة المشكلة الكمونية لـ  $n$  جسيم في مشكلة جسيم واحد أو بالمعنى الأدق للكلمة ثنائي الجسيمات إذا أخذنا بعين الاعتبار إسكان دوران (سبين) "أعلى" أو "أسفل" مع استبدال دوال الموجات الإلكترونية المتعددة بالكثافة الإلكترونية كمتغير أساسي في الحسابات، فإنه يمكن التعبير عن طاقة نظام إلكتروني بدلالة كثافته:

$$E=E(\rho)..... ( II. 8)$$

### 4.2.II. نظرية هوهنبارغ-كوهن (Hohenberg et Kohn)

تعتمد هذه النظرية [9] على الكثافة الإلكترونية، وهي قابلة للتطبيق على أي نظام من الجسيمات المتفاعلة وتتلخص في نظريتي أساسيتين [10] هما :

#### النظرية الأولى:

بالنسبة إلى نظام جسيمي في الحالة الأساسية في تفاعل مع كمون خارجي ( $V_{ext}$  كمون الأنوية) فإن الطاقة الكلية للنظام تعرف بالكثافة الإلكترونية  $\rho(r)$ ، أي جميع خصائص النظام يمكن معرفتها إذا عرفت الكثافة الإلكترونية.

## النظرية الثانية:

تنص هذه النظرية على أن الحد الأدنى للطاقة الكلية للنظام  $E[\rho]$  يتوافق مع الكثافة الإلكترونية للحالة الأساسية  $P_0$  وتكتب بالشكل التالي:

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \dots\dots\dots (II.9)$$

إن عواقب النظريتين الأساسيتين هي أن الاختلاف بين الجهد الخارجي يشير إلى كثافة مختلفة وبالتالي يتم وصف معادلة الطاقة بالتعبير:

$$E[\rho(r)] = F[\rho(r)] + \int V_{ext}(r) \rho(r) d^3r \dots\dots\dots (II.10)$$

$$F[\rho(r)] = \int V_{ext}(r) \rho(r) dr^3$$

هي دالة هوهانبرغ-كوهن وتعرف على أنها دالة وحيدة من أجل أي نظام متعدد الإلكترونات ويمكن كتابتها على الشكل التالي:

$$F[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{e-e}[\rho(r)] \dots\dots\dots (II.11)$$

$$T[\rho(r)] : \text{الطاقة الحركية للنظام الإلكتروني}$$

$$V_{e-e}[\rho(r)] : \text{طاقة التفاعل الكهرون-الكهرون}$$

نظرية هوهانبرغ كوهن تؤكد وجود دالة الكثافة بدلالة طاقة النظام لكنها لا تعطي أي معلومات على حل هذا المشكل.

## 5.2.II. معادلات كوهن-شام (Kohn-Sham):

إن حركة الإلكترونات يصعب وصفها بشكل دقيق من خلال كثافتها الإلكترونية، كما أن مبدأ باولي للاستبعاد يجعل الأمور أكثر تعقيدا بسبب الدوال المختلفة التي يجب أخذها بعين الاعتبار، ولتحقيق هذه الغاية، قام كل من كوهن وشام بتطوير نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) من خلال

وضع معادلات محاكية لمعادلة شرود ينقر بهدف تحديد الدوال الموجية التي توافق أقل قيمة للطاقة الكلية .

إن تم التغلب على هذه المشكلة باستخدام نظام فعلي للإلكترونات مستقلة (غير متفاعلة) تخضع لكمونات خارجية فعالة  $V_{eff}$  ناتجة عن الأنوية والإلكترونات الأخرى، بحيث يكون لديها نفس الكثافة الإلكترونية للنظام الحقيقي، مع الأخذ بعين الاعتبار مبدأ باولي، وتعطى طاقة كوهن-شام [8] بالعلاقة التالية:

$$E_{V_{ext}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{ext}[\rho] \dots \dots \dots (II.12)$$

$T_0$ : الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة

$V_H$ : كمون هارترتي

$V_{xc}$ : كمون تبادل-ارتباط

أخيراً، تختزل معادلة شرودينقر في هذه الحالة إلى معادلة كوهن-شام:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}), \quad i = 1, \dots, N \dots \dots \dots (II.13)$$

$$V_{eff} = V_{Hartree} + V_{xc} + V_{ext} \dots \dots \dots (II.14)$$

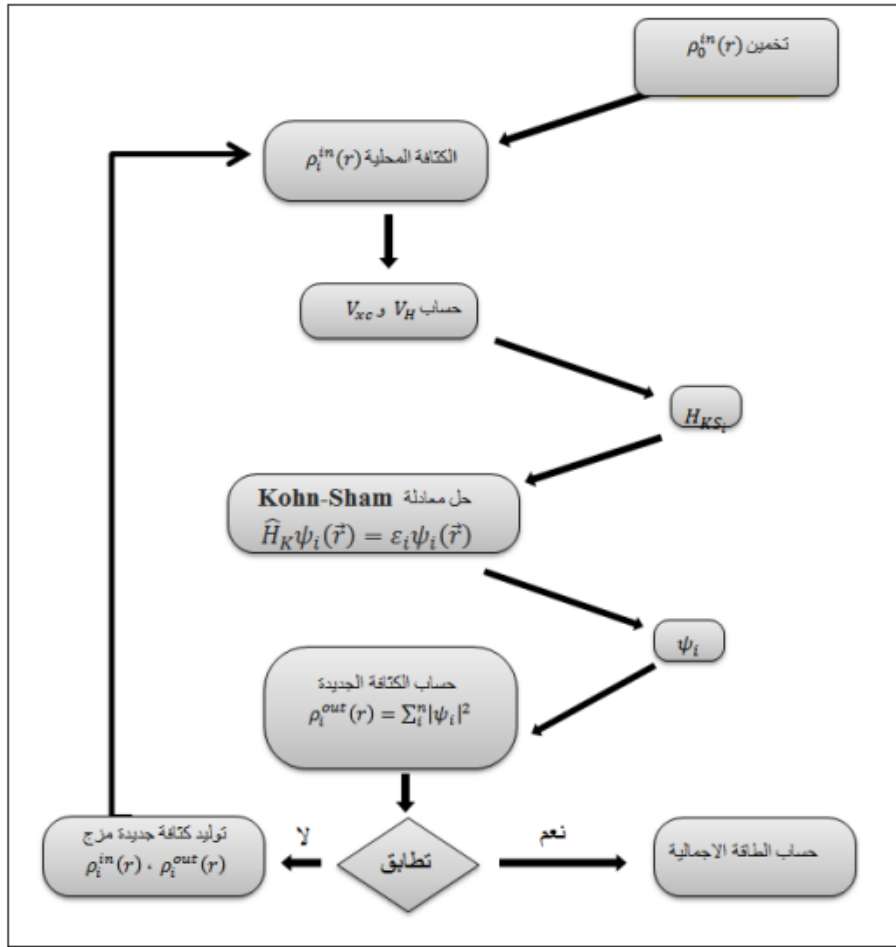
ونكتب كمون هارترتي:

$$V_{Hartree} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \dots \dots \dots (II.15)$$

$$\hat{V}_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \dots \dots \dots (II.16)$$

ونكتب الكثافة:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \dots \dots \dots (II.17)$$



الشكل (1.II): خوارزمية حل معادلة كوهن-شام [8]

## 6.2.II. تقريب الكثافة المحلية (LDA):

فكرة تقريب الكثافة المحلية هي استبدال كثافة الإلكترون لنظام حقيقي بكثافة إلكترون متجانس. يتم التعبير عن طاقة الارتباط التبادلي على النحو التالي:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \dots\dots\dots (II.18)$$

وتعطى طاقة التبادل-ارتباط بالعلاقة:

$$\epsilon_{xc}[\rho] = \epsilon_x[\rho] + \epsilon_c[\rho] \dots\dots\dots (II.19)$$

حيث:

$\epsilon_x$ : طاقة الارتباط

$\epsilon_c$ : طاقة التبادل

وتعطى :

$$\epsilon_{xc}[\rho] = -\frac{3}{4} \left( \frac{3\rho(r)}{\pi} \right)^{1/3} \dots \dots \dots (II.20)$$

هذا التقريب الافضل لأنظمة الكثافة المتغيرة ببطء لأنه من المفترض أن تكون الكثافة ثابتة محلياً [11]، لكنها ليست كذلك، ولا يتم احترامها في الممارسة التجريبية. ومع ذلك أثبت LDA فعاليتها في التطبيقات على الذرات والجزيئات.

### 7.2.II. تقريب التدرج المعمم (GGA):

هذا التقريب هو تصحيح لتقريب كثافة الموضع LDA حيث يتجاوزه في الدقة ويضيف له اعتبارات تغيرات كثافة الإلكترونات  $\rho(r)$  عبر تدرج الكثافة الإلكترونية  $\nabla\rho(r)$  وتكتب عبارة الطاقة على الشكل التالي:

$$E_{XC}^{GGA} = \int \rho(r) \epsilon_X^{GGA} [\rho, |\nabla\rho(r)|, ] d^3r \dots \dots \dots (II.21)$$

هناك عدد من العبارات المقترحة لتقريب GGA [12]، ومن ابرز العبارات الأكثر استعمالاً تلك التي اقترحت من طرف كل من :

(PW91) [13]، (PBE) [14]، (WC, 2006) [15] و (PBEsol, 2008) [16].

### 8.2.II. تعديل بيك وجونسون (mBJ):

إن نتائج LDA أو GGA للخصائص الإلكترونية مثل فجوات النطاق سيئة كثيراً. لذلك تم التقليل من الثغرات، فهذا التعديل يهدف إلى تصحيح قيمة فجوة الطاقة المحسوبة بواسطة LDA و GGA، تم

اقتراحه لأول مرة بواسطة باك وجونسون (Becke and Johnson) [17] تم نشره مؤخراً بواسطة تغان وبلاحة (Tran and Blaha) [18] وتعتبر عن المعادلات:

$$V_{x,\sigma}^{mBJ}(r) = cV_{x,\sigma}^{BR}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_\sigma(r)}{\rho_\sigma(r)}} \dots \dots \dots (II.22)$$

حيث:

$$\dots \dots \dots \rho_\sigma(r) = \sum_{i=1}^{n_\sigma} |\psi_{i,\sigma}(r)|^2 \text{ كثافة الالكترون (II.23)}$$

$$II.24) t_\sigma(r) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_\sigma} \nabla \psi_{i,\sigma}^*(r) \dots \dots \dots \text{ كثافة الطاقة الحركية}$$

$$V_{x,\sigma}^{BR}(r) = -\frac{1}{b_\sigma(r)} \left( 1 - e^{-x_\sigma(r)} - \frac{1}{2} x_\sigma(r) e^{-x_\sigma(r)} \right) \dots \dots \dots (II.25)$$

### 3.II. طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية (FP-LAPW):

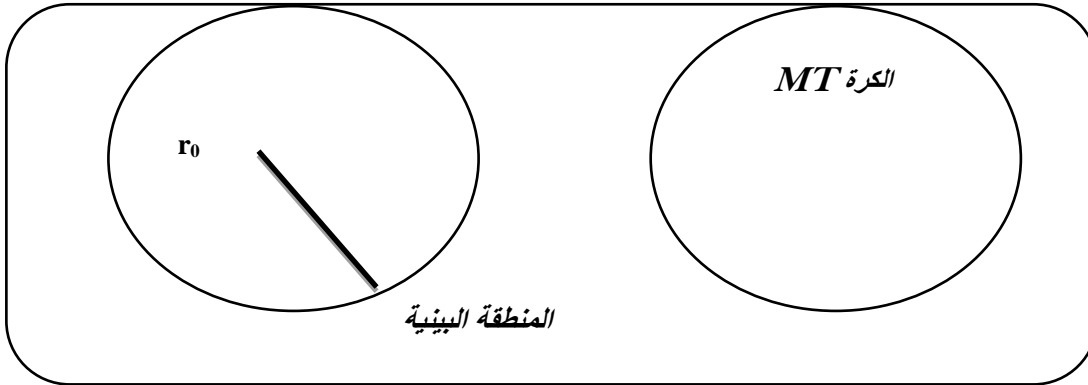
عام 1937 نشر سلاتر (Slater) [18] طريقة الموجة المستوية المتزايدة APW، بعد ذلك عرض أندرسون (Anderson) [12] طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا و الكمون الكامل FP-LAPW، وهذه الطريقة هي أساسا تحسين لطريقة APW. وتعطى بالعلاقات التالية:

$$V(r) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) \text{ à l'intérieur de la sphère} \\ \dots \dots \dots (II.26) \\ \sum_K V_K(r) e^{iK\vec{r}} \text{ à l'extérieur de la sphère} \end{cases}$$

### 1.3.II. طريقة الموجة المستوية المعززة (APW):

اقترح سلاتر [19] هذه الطريقة من اجل إيجاد حل لمعادلة شرودينغر لإلكترون وحيد، يعتمد مبدأ هذه الطريقة على أن الإلكترونات المجاورة لنواة تتصرف مثل النواة أما الإلكترونات البعيدة نسبيا فهي

تتصرف تصرف الإلكترونات الحرة. ومن هذا المنطلق تقسم خلية الوحدة إلى منطقتين كما هو موضح في الشكل (2.II):



الشكل (2.II): شكل كمون MT [20].

المنطقة الأولى داخل كرة MT. تشمل كل من الأنوية و الإلكترونات شديدة الارتباط بها . المنطقة الثانية المنطقة البينية تحيط بالكرات، وتشمل الإلكترونات ضعيفة الارتباط بالأنوية . حيث  $r_0$  يمثل نصف قطر كرة MT . ويمكن ترجمة ما سبق بالصيغة الرياضية التالية:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(\vec{G}+\vec{k})\vec{r}} & r > r_0 (I) \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < r_0 (MT) \end{cases} \dots\dots\dots (II.27)$$

حيث:

$\Omega$ : هو حجم الخلية الأولية.

$Y_{lm}$ : الدالة الهرمونية الكروية .

$C_G$ : معاملات النشر .

$U_l$ : هي الحلول المنتظمة لمعادلة شرودينغر للجزء الشعاعي

وتعطى معادلة شرودينغر الشعاعية كالتالي:

$$(E_2 - E_1)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2rU_2}{dr^2} \dots\dots\dots (II.28)$$



ولضمان استمرارية الدالة على سطح الكرة MT تنشر المعاملات بدلالة المعاملات  $A_{lm}$  الخاصة بالأمواج المستوية في المنطقة البينية، المعاملات الطاقوية تسمى معاملات التغير في الطريقة APW بعد الحسابات نحصل على :

لضمان استمرارية الدالة  $\Phi(r)$  يجب تطوير المعاملات  $A_{lm}$  وفقاً للمعاملات  $C_G$  للموجات المستوية الموجودة في المناطق البينية على سطح كرة MT. يتم التعبير عن هذه المعاملات  $A_{lm}$  كالتالي:

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{\frac{1}{2}} U_l(r_l)} \sum_G C_G J_l(|\vec{k} + \vec{G}| r_0) Y_{lm}^*(\vec{k} + \vec{G}) \dots \dots \dots (II.29)$$

تعتمد الدالة  $U_l(r)$  في المعادلة (30.II) على الطاقة  $E_l$ ، ويمكن أن تصبح صفراً عند سطح كرة MT. إذن هذه الملاحظة تؤدي إلى الفصل بين وظائف الموجة الشعاعية ووظائف الموجة المستوية. تعتبر هذه الملاحظة مشكلة. للتغلب عليها، تم إجراء العديد من التعديلات على طريقة APW، لا سيما تلك التي اقترحها أندرسون (Andersen) و كولينغ (Koelling) [13]. ما قيل سابقاً أدى إلى ولادة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW.

### II.3.2. طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً LAPW:

طور أندرسون (Anderson) طريقة LAPW استناداً على طريقة APW الخاصة بالعالم سلاتر. حيث تعطى عبارات الدوال الأساسية في هذه الطريقة كالتالي:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{-i(\vec{k} + \vec{G})r} & r > r_0(I) \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & r < r_0(MT) \end{cases} \dots \dots (II.30)$$

حيث:

$A_{lm}$ : المعاملات الموافقة للدالة  $U_l$

$B_{lm}$ : المعاملات المقابلة للدالة  $U_l$

طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً FP-LAPW تضمن استمرار دالة الموجة على سطح كرة MT.

## 3.3.II. برنامج Wien2K:

في حساباتنا استخدمنا طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا المدمجة في برنامج Wien2K [21] الذي تم تطويره في معهد كيمياء المواد بالجامعة التقنية في فيينا من طرف (Karlheinz Schwarz و Peter Blaha)، كأساس تم تعيينه لحل معادلات Kohn-Sham. هذه الطريقة تسمى جميع الإلكترونات، لأن جميع الإلكترونات تأخذ في الاعتبار في الحسابات، لذلك لا يوجد تقريب للجهد حول النوى. في هذه التقنية، يتم تقسيم خلية الوحدة إلى منطقتين، منطقة بالقرب من النواة الذرية أو المجالات الذرية تسمى كرات Muffin Tin (RMT) والتي تتمحور حول النواة، المنطقة الثانية هي المنطقة الخالية بين الذرات، وهي موصوفة بالموجات المستوية. ويستند الحساب إلى طاقة القطع التي تفصل الحالات الأساسية عن حالات التكافؤ والمنتج عديم الأبعاد RMTKmax، والذي يمثل الطاقة الفاصلة من الأمواج. وهو من أحسن البرامج لمعرفة خصائص البلورات، أول إصدار كان سنة 1990، حيث يشهد تطورا سريعا في السنوات الأخيرة حيث أجريت عدة تحديثات على برنامج Wien الأصلي نذكر منها (WIEN93, WIEN2000, WIEN97, WIEN95).

لقي Wien2K استخداما كبيرا وهذا راجع للتطور الكبير الذي عرفه لا سيما من حيث السرعة وسهولة استخدامه فأضيفت له تحسينات متنوعة، فهو يحتوي على مجموعة من البرامج الفرعية المنفصلة:

**NN**: يحدد هذا البرنامج المسافة بين كل ذرة وجوارها الأقرب كما يساعد في تحديد أقطار الذرات .

**LSTART**: يبين هذا البرنامج الكثافة الذرية ويحسب الفرق في طاقة المدارات و بالتالي يحسب بنية عصابات الطاقة.

**SYMMETR**: يولد عمليات التناظر في الجملة، يحسب المجموعة النقطية لمواقع الخاصة بالذرات، يولد المعامل الأساسي لهرمونية الشبكة وحساب مصفوفة الدوران الموضعي.

**KGEN**: يولد المكعبات في منطقة بريوان **K** .

**DSTART**: يولد الكثافة الذرية الأولية لبداية دورات الحساب الذاتي **SCF** الناتجة من الكثافة الذرية والمولدة من **LSTART**.

في حين أن دورات الحساب الذاتي **SCF** محددة في النقاط التالية:

**LAPW0** : يولد الكمون انطلاقا من الكثافة الإلكترونية.

**LAPW1**: حساب عصابات التكافؤ، القيم الذاتية و الأشعة الذاتية.

**LAPW2**: حساب كثافة التكافؤ من الأشعة الذاتية.

**LCORE**: حساب الحالات القلبية والكثافة.

**MIXER**: يخلط الكثافة الداخلة و الخارجة.

خطوات إجراء عمليات المحاكاة باستخدام برنامج WIEN2k:

### (أ) تحضير ملف البنية:

- اختيار مجموعة الفضاء للمادة المختارة.
- المواقع الذرية.
- اختيار RMTs من الذرات المعدلة بشكل مناسب في الهيكل الخلوي الوحدوي.

### (ب) التهيئة:

تتم تهيئة المواد من خلال الخطوات التالية:

❖ الكشف عن التناظر.

❖ توليد الإدخال التلقائي.

❖ تحديد نقاط  $k$  التي تم إنشاؤها في منطقة Brillouin

❖ الحد الأدنى من طاقة الفصل المطلوبة لتحقيق الاستقرار في بنية خلية الوحدة.

### (ت) حسابات SCF:

يتعين علينا اتخاذ القرار المناسب فيما يتعلق بطبيعة المواد المختارة. بالنسبة للمادة غير المغناطيسية، يجب اختيار خيار الاستقطاب الدوراني. في الحالة التي تكون فيها المادة ممغنطة، يجب بالضرورة مراعاة الخطوات التالية:

✓ استقطاب الدوران

✓ اقتران تدور في مدار (نظام إلكتروني موضعي للغاية).

✓ اختيار المصفوفة القطرية في أنظمة شديدة الترابط.

✓ تقارب حد الإلكترونات والشحنات.

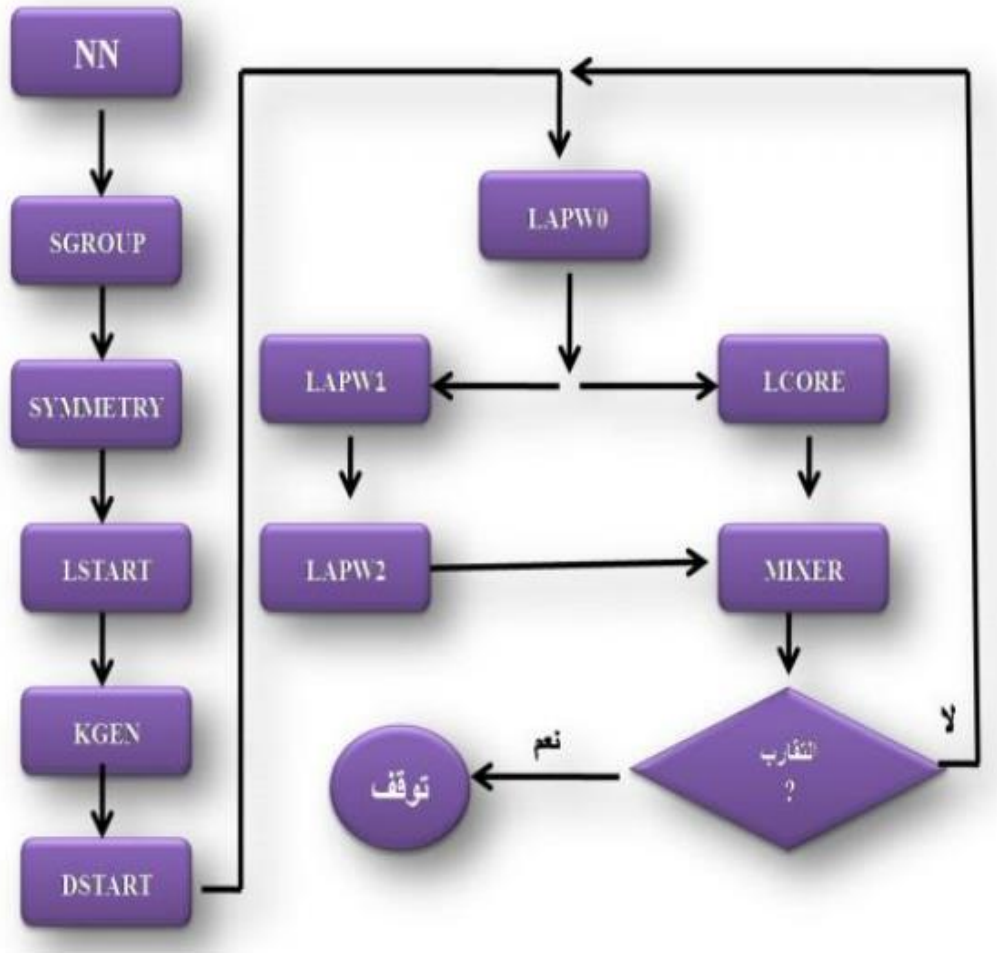
بعد الانتهاء بنجاح من SCF، يتم تحليل الخصائص على أنها ثوابت الشبكة عند التوازن، معامل

الحجم، طاقة التماسك، هياكل النطاق، العزم المغناطيسي، كثافة الحالات، ... إلخ.

تتوفر أيضًا برامج إضافية لهذا الرمز لتحليل السلوك المرن والحراري للمواد على نطاق واسع من الضغط ودرجة الحرارة.

### 1.3.3.II. استخدامات برنامج Wien2K:

- حساب عصابات الطاقة وكثافة الدوال لسطح فرمي.
- إيجاد الكثافة الإلكترونية وكثافة سبين وعوامل البنية للأشعة السينية.
- معرفة معلومات حول الطاقة الإجمالية، القوى النووية، هندسة توازن الذرات في الفضاء و التحسينات البنيوية.
- تدرج الحقل الكهربائي.
- استقطاب الدوران ( في حالة ما إذا كانت البنية تتعمق بالعازل الكهربائي الشفاف).
- تحديد الخصائص المغناطيسية، البصرية، المرنة،... إلخ.
- تحديد طاقة انبعاث وامتصاص الأشعة السينية R.



الشكل (3.II): بنية برنامج Wien2K [21].

**4.II. الخاتمة:**

في هذا الفصل، ناقشنا الطرق النظرية المختلفة لحل معادلة شرودينغر، تسمح طرق الحساب من حيث المبدأ بحساب استجابة أي أنظمة بدرجة الدقة المطلوبة. تتطلب هذه الأساليب تدريباً مسبقاً في الممارسة. في الواقع يعد تنوع الأساليب أمراً مهماً لحل مشكلة معينة بشكل صحيح في أفضل الظروف، لتكون قادراً على الاختيار الفعال للطريقة أو الطرق الأكثر ملائمة لهذا النوع من المشكلات.

- [1] M. Born and J. R. Oppenheimer, Ann. Phys. 84, 46 ,(1927).
- [2] D. R. Hartree, Cambridge Phil. Soc. 24, 89 (1928).
- [3] V. A. Fock, Z. Phys., 15, 126 (1930)
- [4] E. P. Wigner, Trans. Faraday Soc., 34, 117 (1938).
- [5] E. Arras, thèse de Doctorat, Université de Grenoble, France (2010)
- [6] L.H.Thomas, Pro. Combridge Philos. Soc. 23,32 (1927).
- [7] E. Fermi, Z. Phys. 48, 73 (1928).
- [8] W. Kohn, L.J. Sham, phys.Rev.A140 1133 (1974).
- [9] H.Fouad El Haj, Thèse de doctorat, Université de Metz, France (2000).
- [10] E. Sjöstedt, L. Nordström, D.J. Singh, Solid State Commun, 114, 15 (2000).
- [11] S. J. Vosko, L. Wilk and M. Nussair, Can. J. Phys. 7, 1200 (1980).
- [12] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A.Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, and C.Fiolhais, Phys. Rev.B 46, 1521 (1992).
- [13] J.P.Perdew, Y.Wang, Phys. Rev.B 33, 8800 (1986) .
- [14] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244(1992).
- [15] Z. Wu, R. E. Cohen, Phys. Rev., B 73 ,235116 (2006).
- [16] J. P. Perdew, A.Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, Phys. Rev. Lett., 100, 131306 (2008).
- [17] A. D. Becke and E. R. Johnson, J. Chem. Phys. 124 221101 (2006)
- [18] J.C.Slater , Phys. Rev. 81 385(1951).
- [19] J. C. Slater, Adv. Quantum Chemistry 1, 35 (1973).

---

[20] D. J. Singh, L. Nordstrom, Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW Method, 2nd Ed, Springer Science + Business Media, Inc., USA, 200

[21] P. Blaha, S. Karlheinz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k, An Augmente dPlane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, A-109 Vienna, Austria (2017).

الفصل الثالث

النتائج والمناقشة



**1.III. المقدمة**

منذ أن تم استخدام حسابات المبادئ الأولى للتنبؤ ب نصف هسلر (NiMnSb) بواسطة de Groot وزملائه عام 1983 [1]. ومع تطور الحوسبة، تم إجراء العديد من الدراسات النظرية و التجريبية لإثبات المغناطيسية الحديدية نصف المعدنية لمركبات هسلر [2,3]، من خلال حساب خواصها الهيكلية و المرنة و الإلكترونية والمغناطيسية والبصرية، لتطوير أجهزة Spintronic [4,5]، وذلك بفضل سلوكها كأشباه الموصلات و المعادن.

أظهرت العديد من الدراسات النظرية حول سبائك هسلر الرباعية مع عناصر انتقالية رباعية الأبعاد طابعها نصف المعدني، كما يتضح من عمل Gross و al [6,7]. المعادن ذات درجة حرارة كوري Curie العالية وبالتالي فهي مفيدة لتطبيقات Spintronics، تتبلور سبائك هسلر الرباعية في بنية بلورية من نوع LiMgPdSb مع مجموعة فضائية F-43m [8,9]، ولها الصيغة الكيميائية  $XX'YZ$  حيث X و X' و Y هي معادن انتقالية و Z عنصر من المجموعة III أو IV أو V [10,11].

في هذا الفصل قمنا بحساب كل من الخصائص البنيوية و الإلكترونية وكذا المغناطيسية لسببكتين  $CoRuZrZ$  حيث  $(Z=Si,Sn)$  من مركبات هسلر الرباعية التي كانت موضوع مذكرتنا، فيما يتعلق باختيار مصطلح التبادل والارتباط في هذا العمل، كان اختيارنا لتقريب التدرج المعمم (GGA) [15,16]. و كذا لتقريب التدرج المعمم المعدل (mBJ) الذي اقترحه Becke و Johnson [17]. استعملنا طريقة الأمواج المستوية المعززة الخطية والكاملة (FP-LAPW). بالإضافة إلى ذلك ناقشنا أيضا استقرار هذه السبائك من خلال حساب طاقات تكوينها وطاقات تماسكها، ثم ركزنا على دراسة الخاصية نصف المعدنية لهذين المركبين. تمت دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والمغناطيسية لهذه المركبات باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). علاوة على ذلك قمنا بدراسة استقرار الطابع نصف المعدني و الخصائص المغناطيسية.

**2.III. طريقة الحساب**

تم الحصول على نتائج الحسابات الواردة في هذا الجزء بواسطة برنامج WIEN2k بناء على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). هذا البرنامج هو تنفيذ لطريقة الموجة المستوية المعززة الكلية المحتملة (FP-LAPW).

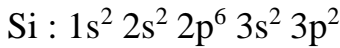
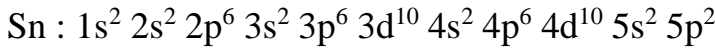
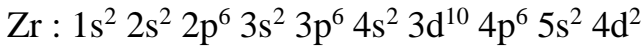
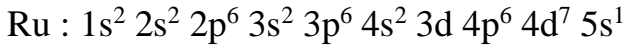
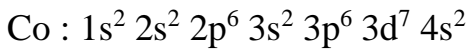
تم وصف طاقة التبادل والارتباط من خلال:

1. تقريب التدرج المعمم (GGA) لكل من Perdew و Burk و Ernzerhof [18].

2. تقريب Becke-Johnson المعدل (mBj) [19].

في طريقة FP-LAPW تم تطوير وظائف الموجة ل Kohn و Sham من حيث التوافقات الكروية داخل مجالات MV لقيمة قصوى ل Imax وفي سلسلة فورييه في المنطقة الخالية. الموجات المستوية تقتصر على:

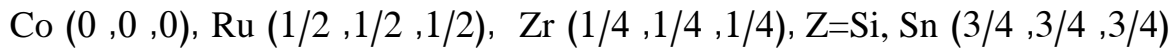
RMT.Kmax=8 (RMT) هو أصغر نصف قطر للكروية MT و kmax هو الحد الأقصى لمتجه الموجة (K)، عدد نقاط K المستخدمة (K point) لأخذ عينات من منطقة Brillouin الأولى في الفضاء المتبادل يؤخذ 3000 نقطة. تتكرر عملية التكرارات المتسقة ذاتيا حتى طاقة التقارب الأدنى. التكوين الإلكتروني للعناصر المكونة للمركبين (Z=Si,Sn) CoRuZrZ مذكور أدناه:



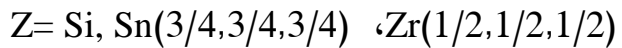
### 3.III الخصائص البنيوية للمركبين: CoRuZrZ (Z=Si, Sn)

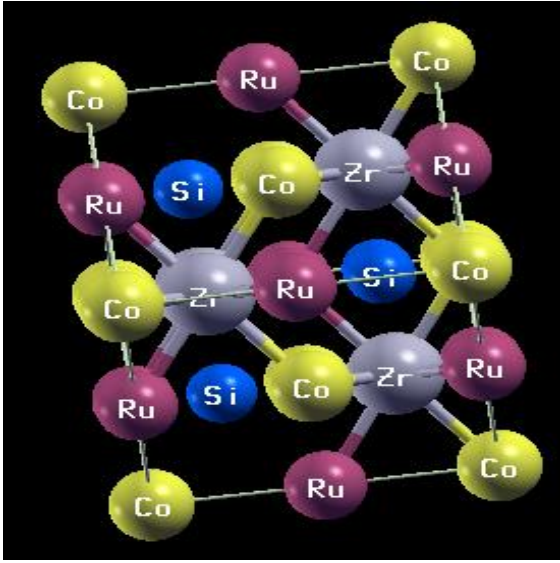
#### 1.3.III البنية البلورية للمركبين CoRuZrSi, CoRuZrSn

تتبلور سبيكتي هسلر الرباعيتين CoRuZrZ (Z=Si,Sn) في هيكل مكعب (CFC)، حيث يأخذ تموضع الذرات من النوع Cu<sub>2</sub>MnAl المتكونة من أربع شرائح فرعية مكعبة مركزية الوجه المواقع:

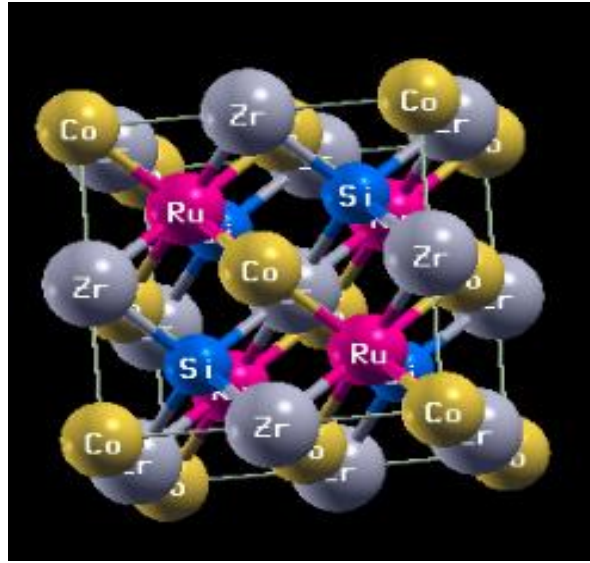


أما بالنسبة للنوع (Hg<sub>2</sub>CuTi) فتحتل الذرات المواقع: Co(0,0,0)، Ru(1/4,1/4,1/4)





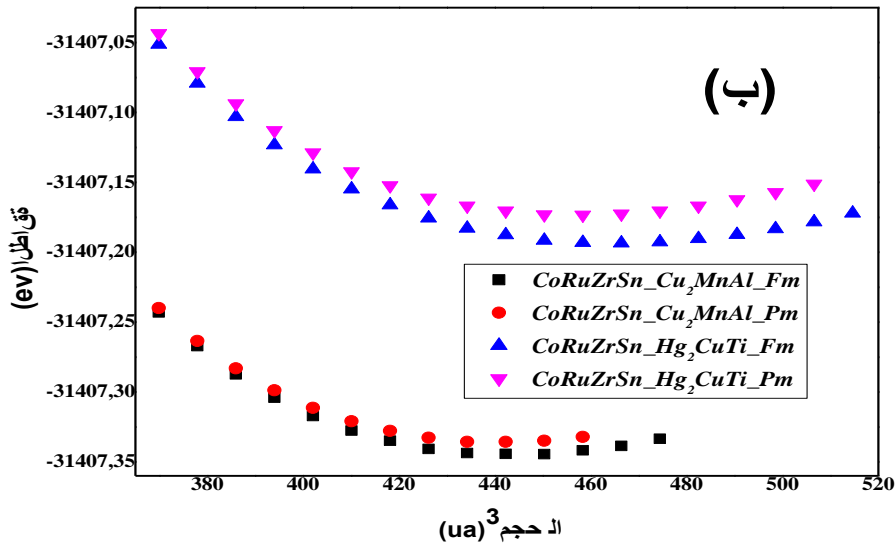
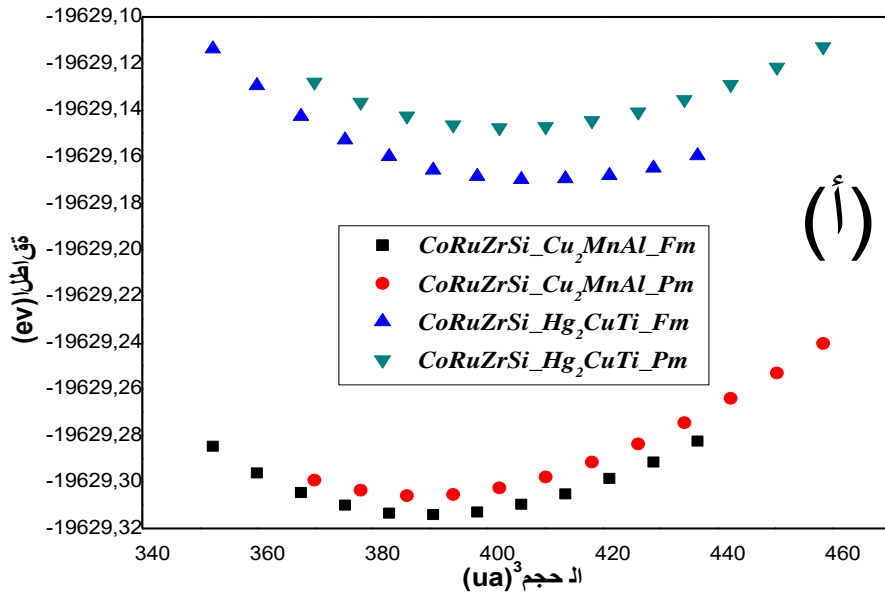
الشكل (2.III): البنية البلورية للمركب  
CoRuZrSi النوع (Cu<sub>2</sub>MnAl)



الشكل (1.III): البنية البلورية للمركب  
CoRuZrSi النوع (Hg<sub>2</sub>CuTi)

الخطوة الأولى المهمة هي تحديد الخصائص الهيكلية للمادة المراد دراستها. تتيج لنا معرفة هذه المعلومات الوصول لاحقا إلى الخصائص الفيزيائية الأخرى.

يتم الحصول على الخصائص الهيكلية عن طريق تقليل إجمالي الطاقة التي تعتمد على حجم CoRuZrSn و CoRuZrSi في المرحلة المكعبة المتمركزة الوجه (الشكلين 1.III، 2.III). تتكرر دورة التحسين حتى الوصول إلى التقارب. تم حساب طاقات الحالة الأساسية كدالة بدلالة الحجم للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn في الحالتين الفيرومغناطيسية (FM) و البارامغناطيسية (PM) للنوعين (Hg<sub>2</sub>CuTi) و (Cu<sub>2</sub>MnAl) بتقريب GGA والمبينة في الشكل (3.III).



الشكل (3.III): تغيرات الطاقة الكمية للمركبين: (أ) CoRuZrSi، (ب) CoRuZrSn بدلالة الحجم.

لاحظنا أن منحنى تغيرات الطاقة يتناقص إلى قيمة سفلى ثم يزداد. هناك قيمة حدية سفلى  $E_{min}$  توافق حجم معين، هذه القيمة تتوافق مع قيمة كثافة الحالة الأساسية للجسيمات حيث ترتبط جميع الخصائص الفيزيائية بهذه الحالة.

نلاحظ أن هناك فرق في الطاقة الكلية للمركبين في الحالتين الفيرومغناطيسية (FM) و البارامغناطيسية (PM) إضافة الى ذلك فإن الحالة الفيرومغناطيسية هي الأكثر استقرارا من الحالة البارامغناطيسية بالنسبة للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn.

تم الحصول على الثابت للمعامل الشبكي  $a_0(A^\circ)$  و معامل الانضغاطية  $B_0$  و مشتقه  $B'$ ، عن طريق الضبط غير الخطي للطاقة الكلية كدالة للحجم وفقا لمعادلة مورناغن (Murnaghan) [20].

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

حيث E: إجمالي الطاقة،  $E_0$ : طاقة الحالة الأرضية، B: معامل الإنضغاط،  $B'$ : مشتق معامل الانضغاط، V: حجم الشبكة،  $V_0$ : حجم الخلية في حالة التوازن.

في الجدول (1.III)، تم تلخيص نتائج تحسين البنية الخاصة بنا ل CoRuZrSi و CoRuZrSn بواسطة تقريب (GGA).

**الجدول (1.III):** قيم كل من ثابت الشبكة  $a$  (Å) و معامل الانضغاطية B (GPa) والمشتقة الأولى لمعامل الانضغاطية  $B'$  للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn.

		$a(\text{Å})$	B(GPa)	$B'$	$E_{\min}(\text{eV})$	
<b>CoRuZrSn - Hg<sub>2</sub>CuTi -type</b>	GGA	6.4736	151.8533	4.4288	-31407.173394	PM
		6.5077	139.7547	4.4189	- 31407.193531	FM
<b>CoRuZrSn -Cu<sub>2</sub>MnAl -type</b>	GGA	6.3945	176.8785	4.4083	-31407.336004	PM
		6.4064	173.5711	4.4573	-31407.344752	FM
<b>CoRuZrSi -Hg<sub>2</sub>CuTi-type</b>	GGA	6.2077	174.7831	4.6284	-19629.147681	PM
		6.2306	168.7874	4.2345	-19629.170185	FM
<b>CoRuZrSi -Cu<sub>2</sub>MnAl-type</b>	GGA	6.1273	212.7662	5.5056	-19629.305913	PM
		6.1355	201.4175	4.3676	-19629.314065	FM

النتائج المتحصل عليها لثابت الشبكة البلورية  $a(\text{\AA})$  للمركبين السابقين تبين أن هناك علاقة قوية بين معامل الانضغاطية B وصلابة المواد وبالتالي المركبين علميا متقاربان من حيث درجة الصلابة. حيث معامل الانضغاطية B للمركب CoRuZrSi أكبر بقليل من معامل الانضغاطية للمركب CoRuZrSn و هذا يعني أن المركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn يتمتعان بصلابة قوية.

### 5.III. الخصائص الالكترونية للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn:

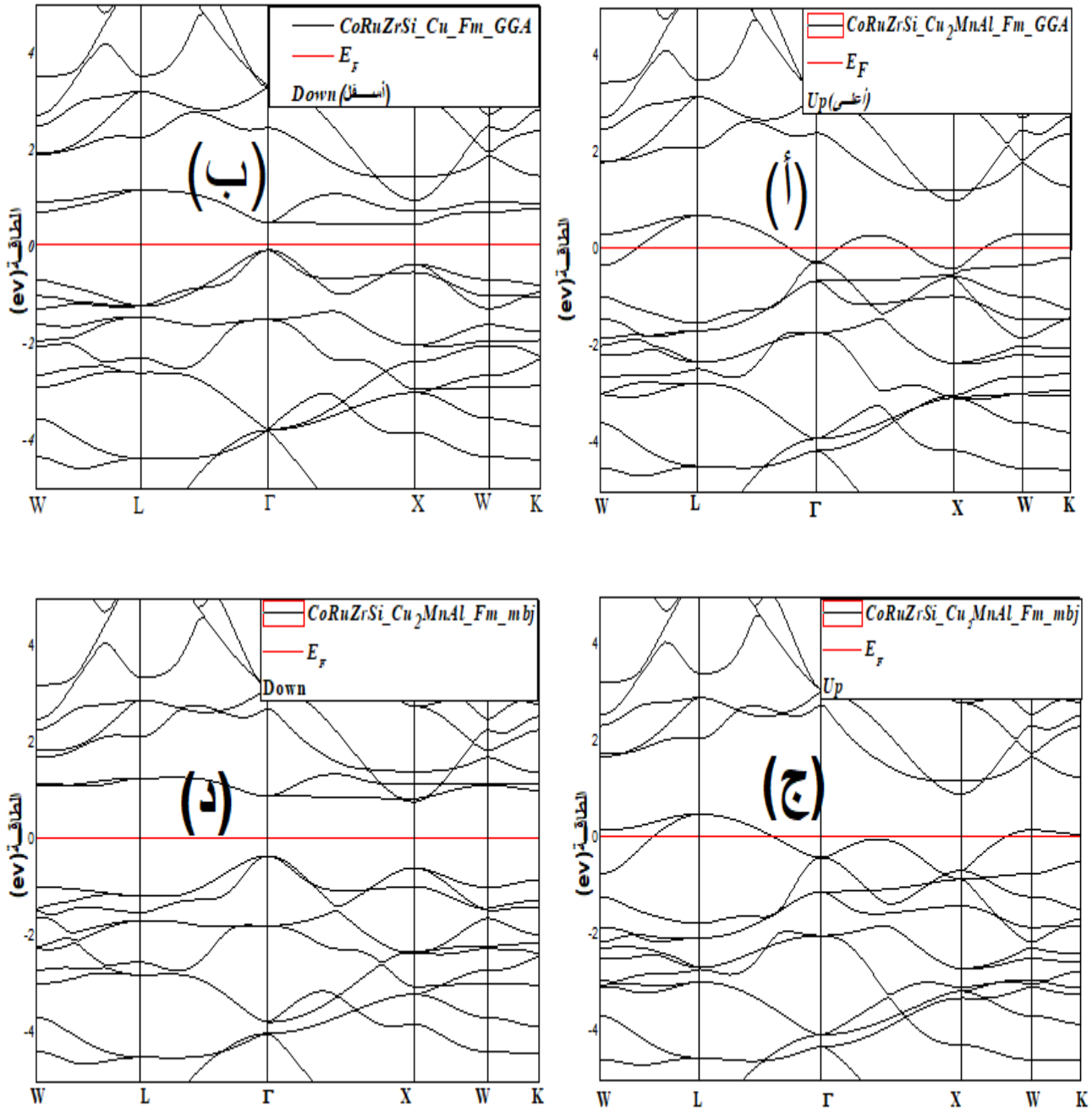
أهمية الخصائص الالكترونية في المادة، تسمح لنا بتحليل و فهم طبيعة الروابط التي تتشكل بين العناصر المختلفة للمادة، وتشمل هذه الخصائص (عصابات الطاقة، كثافة الشحنة و كثافة الحالة).

في هذا الجزء سنقوم بعرض ومناقشة عصابات الطاقة وكثافة الحالات الكمية للمركبات السابقة، مع تحديد الطبيعة الالكترونية لهذه المواد، ولدراسة الطبيعة الالكترونية لهذه المركبات سنقوم بتحديد مساهمة كل من المدارات الالكترونية المشكلة لهذه المركبات في المجال الطاقي المحصور بين  $(-5\text{ev})$  إلى  $(5\text{ev})$  باستخدام طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW تحصلنا على عصابات الطاقة في النقاط عالية التناظر في منطقة بريلووان الأولى للمركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi في تقريب GGA.

### 1.5.III. عصابة الطاقة للمركبين CoRuZrZ=(Si, Sn):

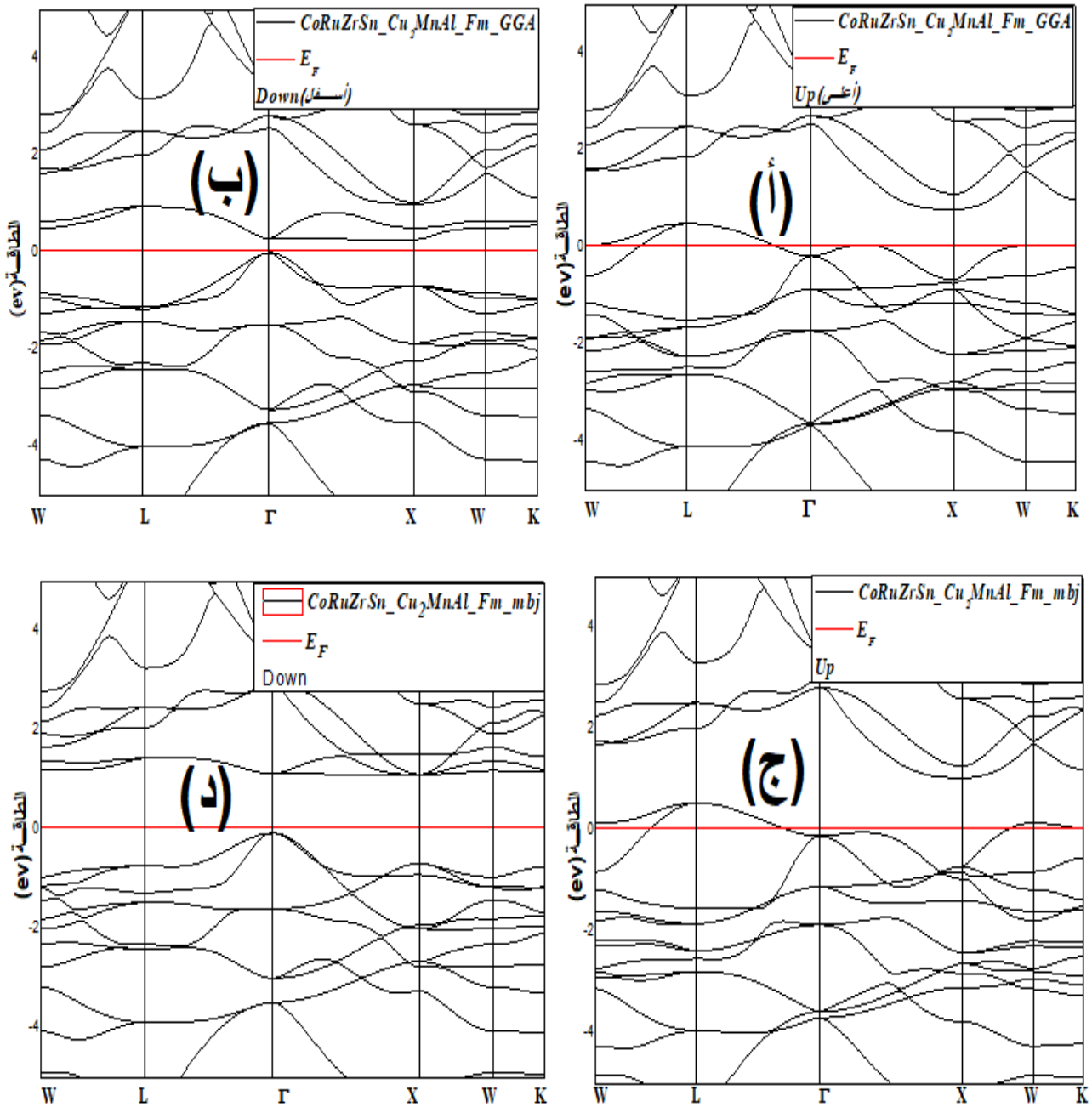
نقوم بدراسة تغيرات الطاقة للإلكترون بدلالة الشعاع الموجي K في الفضاء المعكوس، لإيجاد المانع الطاقي الذي يمثل الفرق بين القيمة الحدية العظمى لعصابة التكافؤ والقيمة الحدية الصغرى لعصابة النقل في نفس النقطة أو نقطتين مختلفتين ونقوم من خلاله بتصنيف المواد الى ناقلة او شبه ناقلة او عازلة .

تحصلنا علي عصابة الطاقة وفق خطوط عالية التناظر في منطقة بريلووان الأولى للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn للنوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  في الحالة الفيرومغناطيسية (FM) وذلك في التقريبات mBJ و GGA لكل من الدوران الأعلى (spin up)/الدوران الأسفل (spin down) كما في الاشكال (4.III)، (5.III).



الشكل (4.III): عصابة الطاقة للمركب CoRuZrSi للنوع Cu<sub>2</sub>MnAl في الحالة

الفيرومغناطيسية (FM) محسوبة في التقريبات mBJ و GGA.



الشكل (5.III): عصابة الطاقة للمركب  $\text{CoRuZrSn}$  للنوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  في الحالة

الفيرومغناطيسية (FM) محسوبة في التقريبات GGA و mBJ .



وفقا للشكل (4.III) المحسوب بواسطة التقريب GGA و mBJ فإنه في حالة الدوران الأعلى (spin up)، نلاحظ أنه لا توجد فجوة في الطاقة، لكن في حالة الدوران السفلي (spin down) يمكننا أن نلاحظ أن نطاق التوصيل يتحرك للأعلى، مما يخلق فجوة طاقة غير مباشرة بين الحد الأدنى لنطاق التوصيل EC الموجود عند النقطة X من منطقة بريلوان الأولى مع الحد الأقصى لنطاق التكافؤ EV الموجود عند النقطة  $\Gamma$ ، لذلك يمكننا القول أن المركب CoRuZrSn يسلك سلوك معدني في حالة الدوران الأعلى وفي الحالة العكسية الدوران الأسفل فإن له سلوك شبه النواقل لوجود فجوة  $E(\Gamma, X)$ . وهذا ما لاحظناه بعد استعمالنا لتقريب (mBJ) إلا أن هذا الأخير سمح لنا بتحسين قيمة الفجوة.

نلاحظ من خلال الشكل (5.III) نفس السلوك المعدني مع تقريب GGA و تقريب mBJ في قناة الأغلبية الدورانية (spin up)، وسلوك أشباه الموصلات في قناة الأقلية الدورانية (spin down) للمركب CoRuZrSn مع فجوة نطاق مباشرة. إذن يمكننا القول أن المركبين لهما خاصية معدن في حالة (spin up) وخاصية أشباه النواقل أو الموصلات في الحالة (spin down) مما يعني أن المركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi نصف معدنيين مهما كان التقريب المستعمل.

### 2.5.III. فجوة الطاقة للمركبين CoRuZrZ (Z=Si, Sn)

قيمة المانع الطاقي للمركبين السابقين مذكورة في الجدول أدناه:

الجدول (2.III): قيم المانع الطاقي من أجل المركبين CoRuZrZ (Z= Si, Sn) في التقريبين GGA

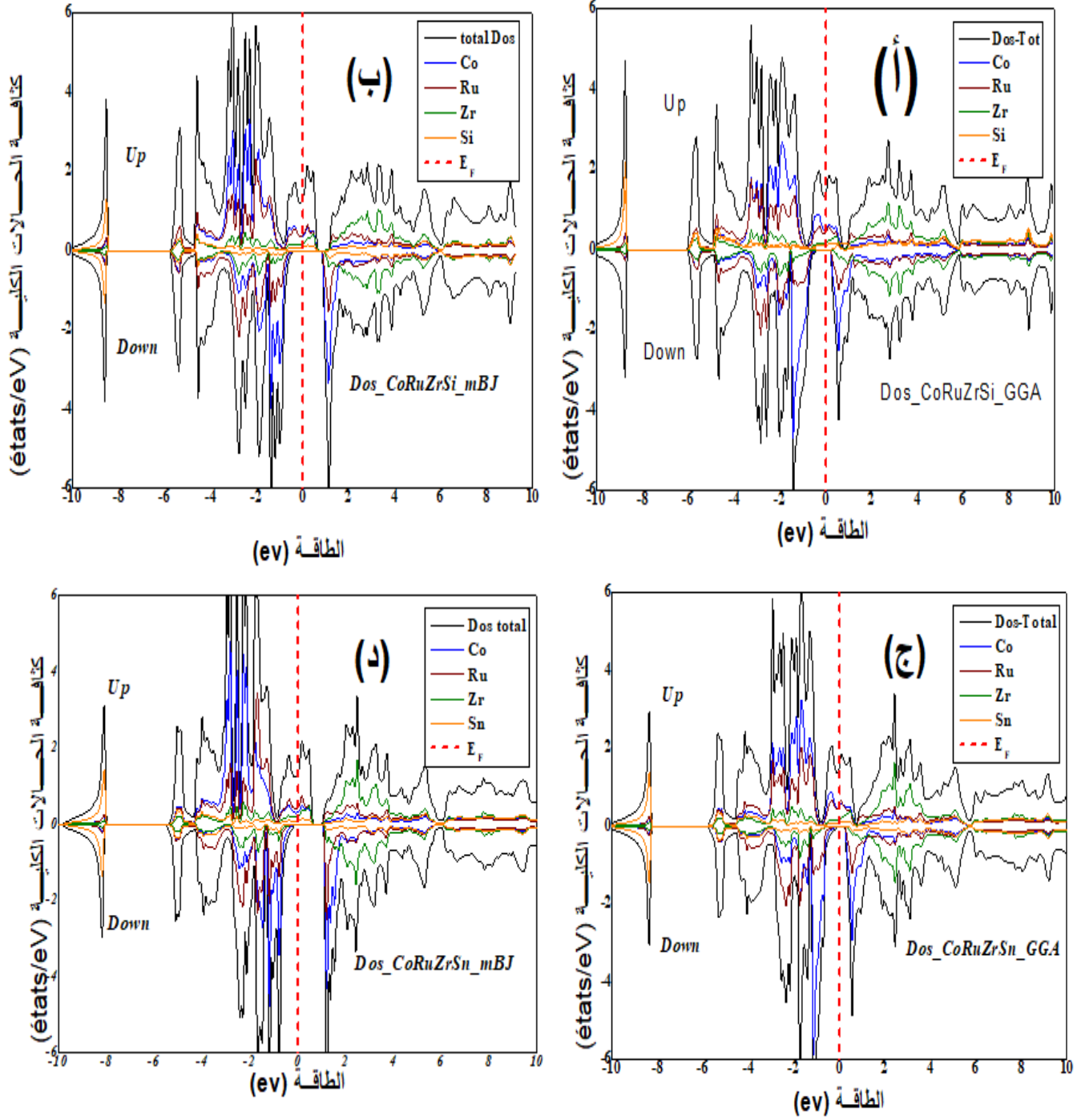
و mBJ.

قيمة الطاقة $E_g$ (ev)	التقريب المستعمل	نوع الدوران	المركب
0.6	GGA	أسفل	CoRuZrSi
1.2	mBJ	أسفل	
0.3	GGA	أسفل	CoRuZrSn
1.17	mBJ	أسفل	

**2.5.III. كثافة الحالات الإلكترونية:**

تعد الكثافة الإلكترونية للحالات (DOS) كمية مهمة لفهم الخصائص الفيزيائية وخصائص النقل للمادة. تحدد (DOS) عدد الحالات الإلكترونية التي تمتلك طاقة معينة في المادة المدروسة، مما يجعل معرفة طبيعة الروابط الكيميائية ممكنة في المادة عن طريق حساب معدل الإشغال لكل حالة ذرية، وبالتالي نقل الشحنة بين الذرات في طريقة LAPW. يمكن أن تتحلل كثافة الحالات إلى كثافتين، الأولى تسمى الكثافة الكلية للحالات والثانية الكثافة الجزئية للحالات والتي تعطى بواسطة العلاقة المذكورة سابقاً [20].

يتم تمثيل كثافة الحالات المحسوبة (DOS) باستخدام تقريب GGA وتقريب Becke-Johnson المعدل (mBJ) لمركبي هسلر  $\text{CoRuZrSi}$  و  $\text{CoRuZrSn}$  كما يبينه الشكل (6.III).



الشكل (6.III): كثافة الحالات للمركبين CoRuZrSi و CoRuZrSn محسوبة بطريقتي GGA و mBJ.

حسب التمثيل البياني لكثافة الحالات الكلية والجزئية المبينة في الشكل نجد (6.III) النتائج التالية:

نلاحظ أن التقريبات GGA و mBJ لهما نفس الشكل العام.

بالنسبة للمركب CoRuZrSi بصفة عامة نلاحظ في الشكل :

المنطقة بين (-10ev و -8ev) من الشكل (أ) و نجد (ب) مساهمة كبيرة بشدة منخفضة من المدار S لذرات Si من أجل الدوران الأعلى (spin up) و (spin down) و الدوران الأسفل.

المنطقة بين (-4ev و مستوى فارمي) نجد مساهمة المستوى الذري d للعنصر Co تكون كبيرة مقارنة بالمستوى الذري d للعنصر Ru من أجل الدوران الأعلى والدوران الأسفل. ويحدث العكس من مستوى فارمي إلى 4ev.

العصابة المتواجدة من (06ev إلى 10ev) ناتجة عن تراكب الحالة p للعنصر Si و الحالة d للعنصر Zr.

العصابة حول مستوى فارمي ناتجة عن تراكب الحالة d للعنصر Co و الحالة d للعنصر Ru في حالتي دوران أعلى ودوران أسفل.

من الواضح أن كثافة الحالات للعنصر Co والعنصر Zr مختلفة، فحالة Co مشغولة كليا حيث لا توجد كثافة حالات بعد مستوى فارمي من أجل دوران أسفل و دوران أعلى.

بالنسبة للمركب CoRuZrSn بشكل عام نلاحظ حسب الشكلين (ج و د) ما يلي:

من (-10ev إلى -8ev) طاقة ضعيفة ناتجة عن حالة s للعنصر Sn.

بين (-4ev و مستوى فارمي) نجد مساهمة المستوى الذري d للعنصر Co تكون كبيرة مقارنة بالمستوى الذري d للعنصر Ru من أجل (spin up) و (spin down) . ويحدث العكس من مستوى فارمي إلى 4ev. ونفس الشيء بالنسبة للمناطق الأخرى كما ذكرناه سابقا. عموما نقول أن المساهمة الأكبر ناتجة عن تراكب الحالة d للعنصر Co و Zr أما باقي الحالات مساهمتها شبه معدومة.

إذن النتائج المتحصل عليها بالنسبة لكثافة الحالات تؤكد ما ذكرناه سابقا بالنسبة لعصابات الطاقة حيث نلاحظ وجود الفجوة في حال الدوران الأسفل (Spin Down) بينما لا توجد في حالة الدوران الأعلى (Spin Up) وهذا ما يبرز الخاصية نصف المعدنية للمركبين السابقين.

### 6.III. الخصائص المغناطيسية للمركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi

#### 1.6.III. العزم المغناطيسي للمركبين CoRuZrZ= (Si, Sn)

يتم تمثيل العزم المغناطيسي بواسطة العزم المغناطيسي المغزلي المحدد بالفرق بين إجمالي عدد الإشغال لمدارات الدوران ذات الأغلبية مطروحا منه مجموع عدد الإشغال لمدارات الدوران ذات الأقلية. تظهر بنية نطاق الطاقة لمادة شبه معدنية عدم تناسق بين حالات الدوران للأعلى والدوران للأسفل مع فجوة طاقة على مستوى فيرمي. يتم التعبير عن استقطاب الدوران P عند EF من حيث كثافة حالات الدوران العالي والدوران المنخفض  $\rho(E_f)\uparrow$  و  $\rho(E_f)\downarrow$  من خلال العلاقة التالية:

$$P = \frac{\rho\uparrow(E_f) - \rho\downarrow(E_f)}{\rho\uparrow(E_f) + \rho\downarrow(E_f)} \dots \dots \dots (3.III)$$

**الجدول (3.III):** يبين قيم العزم المغناطيسي الجزئي والكلي للمركبين CoRuZrZ (Z=Si, Sn)

Les composés	$\mu_{INT}$	$\mu_{Co}$	$\mu_{Ru}$	$\mu_{Zr}$	$\mu_{Sn/Si}$	$\mu_{TOT}$
<b>CoRuZrSn -typ- Cu<sub>2</sub>MnAl</b>						
GGA	-0.14140	0.99351	0.21297	-0.07647	-0.00713	0.98148
mBJ	-0.23653	1.32846	0.06700	-0.13452	-0.02441	1.00000
<b>CoRuZrSi -type- Cu<sub>2</sub>MnAl</b>						
GGA	-0.11232	0.98724	0.20111	-0.07412	-0.00171	1.00019
mBJ	-0.18453	1.15823	0.12563	-0.09170	-0.00773	0.99992

تظهر نتائج الجدول (3.III) أن المركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi لهما عزم مغناطيسي إجمالي قدره 1  $\mu_B$  ولهما تقريبا نفس إجمالي قيمة العزم المغناطيسي.

استقطاب الدوران مهم للمركبين CoRuZrSn و CoRuZrSi ويساوي 100%، P=100%. ترجع المساهمة الرئيسية في العزم المغناطيسي إلى ذرة الكوبالت. بالنسبة للإشارة السالبة لذرات Zr, Si يدل ذلك أن دوران الذرات يكون في الجهة المعاكسة، نلاحظ أن الاستقطاب 100% و هو خاصية أنصاف المعادن.

من المهم التأكيد أنه على حد علمنا ليس لدى المجتمع العلمي قيم تجريبية للعزم المغناطيسي لهذه المواد.

### 7.III. الخاتمة

في هذا الفصل تناولنا نتائج الحسابات التي أجريناها على سبائك هسلر الرباعية  $\text{CoRuZrZ}$  ( $Z=\text{Si, Sn}$ ) بالاعتماد على الطرق الحسابية القائمة على نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) مع تقريب GGA و mBJ. تم الحصول على مواد جديدة مع خصائص مثيرة للإهتمام مناسبة لتطبيقات الأجهزة القائمة على الإلكترونات المغناطيسية والإلكترونات السينية. أولاً وقبل كل شيء، تكشف الخصائص الهيكلية للمرحلة البلورية لسبائك هسلر الرباعية  $\text{CoRuZrSi}$  و  $\text{CoRuZrSn}$  أن الأكثر استقراراً هو الهيكل الفيرومغناطيسي (FM) للنوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ . كما مكنتنا دراسة الخصائص الإلكترونية من خلال بنية النطاق وكثافة الحالات الكلية والجزئية من معرفة أن كلا المركبين  $\text{CoRuZrZ}$  ( $Z=\text{Si, Sn}$ ) يقدمان سلوكاً معدني بالنسبة ل الدوران الأعلى وشبه النواقل بالنسبة ل الدوران الأسفل بالنسبة لكلا التقريبين GGA و mBJ. إذن فهي مركبات ذات خاصية نصف معدنية فيرومغناطيسية. كما لاحظنا اختلافاً بين طريقتي GGA و mBJ ويظهر ذلك من خلال قيم طاقات الفجوة. ثم تمت دراسة الخصائص المغناطيسية والتي بينت أن إجمالي العزم المغناطيسية لكلا المركبين هي  $1\mu_B$  قيمة صحيحة والتي تتفق مع قاعدة سلاتر بولين مما يؤكد لنا الخاصية نصف المعدنية للمركبين السابقين.

- [1] R. A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, New class of materials : half-metallic ferromagnets, *Phys. Rev. Lett.* 50 (25) (1983) 2024-2027.
- [2] C. Felser, G. H. Fecher, B. Balke, Spintronic : a challenge for materials science and solid-state chemistry, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* B 28, 1745 1983.
- [3] J. Kübler, A. R. Williams, and C. B. Sommers, Formation and coupling of magnetic Moments in Heusler alloys, *Phys. Rev. B* 28, 1745 1983,
- [4] M. Oogane, Y. Sakuraba, J. Nakata, H. Kubota, Y. Ando, A. Sakuma, T. Miyazaki, Large tunnel magnetoresistance in magnetic tunnel junctions using  $\text{Co}_2\text{MnX}$  ( $X = \text{Al}, \text{Si}$ ) Heusler alloys, *J. Phys. D : Appl. Phys.* 39 (5) (2006) 834.
- [5] I. Galanakis, K. Zdoğan, E. Çakolu, A proposal for an alternative class of spin filter Materials : hybridization-induced high- $T_c$  ferromagnetic semiconductors  $\text{CoVXAl}$  ( $X = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$ ), *Appl. Phys. Lett.* 103 (14) (2013) 142,404.
- [6] Kundu, A, Ghosh, S, Banerjee, R, Ghosh, S. & Sanyal, B. New quaternary half-metallic Ferromagnets with large Curie temperatures. *Sci. Rep.* 7, 1803 (2017).
- [7] Alijani, V. et al. Electronic, structural, and magnetic properties of the half-metallic Ferromagnetic quaternary Heusler compounds  $\text{CoFeMnZ}$  ( $Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Si}, \text{Ge}$ ). *Phys. Rev. B* 84, 224416 (2011)
- [8] G. Schmidt, D. Ferrand, L.W. Molenkamp, A.T. Filip, B.J. van Wees, Fundamental Obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive Semiconductor, *Phys. Rev. B* 62 (8) (2000) R4790 – R4793,
- [9] G.Z. Xu, E.K. Liu, Y. Du, G.J. Li, G.D. Liu, W.H. Wang, G.H. Wu, A new spin gapless Semiconductors family : Quaternary Heusler compounds, *EuroPhys. Lett.* 102 (2013) 17007.
- [10] X. Dai, G. Liu, G. H. Fecher, C. Felser, Y. Li, H. Liu, New quaternary half metallic Material  $\text{CoFeMnSi}$ , *J. Appl. Phys.* 105 (2009) 07E 901.

- [11] Belbachir, S., Abbes, C., Belkaid, M.N. et al. First-Principle Study of Structural, Elastic, Electronic and Magnetic Properties of the Quaternary Heusler CoZrFeP. J Supercond Nov Magn 33, 2899–2905 (2020).
- [12] C. Abbes, S. Belbachir, H. Abbassa, S. Meskine, A. Boukra & A. Boukourt (2021) Robust Half-metallicity in CoZrMnZ (Z =  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\rho$ , As and Sb) quaternary Heusler alloys, Philosophical Magazine, 101 :7, 892-904,
- [13] H. J. F. Jansen, A. J. Freeman, Total-energy full-potential linearized augmented-plane-Wave method for bulk solids : Electronic and structural properties of tungsten, Phys. Rev. B,30 (1984) 561.
- [14] W. Kohn, L.J. Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation Effects, Phys. Rev. 140 (1965) A1133 – A1138,
- [15] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple. Phys. Rev. Lett.77 (1996) 3865
- [16] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais, Atoms, molecules, solids, and surfaces : Applications of the generalized gradient Approximation for exchange and correlation, Phys. Rev.B 466,671 (1992).
- [17] F. Tran, P. Blaha, Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential, Phys. Rev. Lett. 102 (2009), pp, 226401.
- [18] w. Zhigang and R.E.Cohen. Phys. Rev. B 73, 235116 (2006)
- [19] F.Casper, T. Graf, S.Chadov, B.Balke, et F. Felser. Semiconductor Science and Technology, 27, 063001 (2012).
- [20] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. Usa 30, 5390(1944).



خاتمة عامة

## خاتمة عامة

قمنا في هذا العمل بدراسة الخصائص البنيوية، الإلكترونية والمغناطيسية للسبيكتين  $\text{CoRuZrSn}$  و  $\text{CoRuZrSi}$ ، معتمدين على طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطياً، المدمجة في برنامج  $\text{wien2k}$  في الإطار العام لنظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT) و ذلك في كل من التقريبين التدرج المعمم GGA والتقريب المعدل mBJ.

تظهر الخصائص البنيوية أن الطابع الأكثر استقراراً للمركبين هو الحالة المغناطيسية الحديدية (FM) من النوع  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$ . كما أثبت حساب كل من ثابت الشبكة ومعامل الانضغاط صلابة المركبين، أما من خلال الخصائص الإلكترونية تم إثبات أن كلا المركبين ( $\text{CoRuZrSi}$  و  $\text{CoRuZrSn}$ ) لهما الخاصية نصف المعدنية (سلوك معدني في الدوران الأعلى (سبين أعلى) وسلوك أشباه النواقل في الدوران الأسفل (سبين أسفل))، مع فجوة مباشرة قيمتها  $1.17\text{eV}$  بالنسبة للمركب  $\text{CoRuZrSn}$  بواسطة تقريب mBJ و  $1.2\text{eV}$  بالنسبة للمركب  $\text{CoRuZrSi}$  مع نفس التقريب. ومن خلال الخصائص المغناطيسية تم التأكد من الخاصية نصف المعدنية حيث بلغ العزم المغناطيسي الكلي لكلا المركبين  $1\mu_B$  واستقطاب 100%. هذه الخصائص تجعل من هذين المركبين من أوائل المترشحين للصناعات الإلكترونية المستقبلية بحيث لم يثبت حتى الآن قياس تجريبي أو قيم محسوبة لهذه المركبات.

إن ما أنجزناه في هذا العمل يفتح المجال للتطبيق وتجريب هذه الخصائص مستقبلاً لهذه المركبات ( $\text{CoRuZrSi}$ ,  $\text{CoRuZrSn}$ ) لتكون ضمن ميدان صناعات أجهزة Spintronic والأجهزة السينية.

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخصائص الإلكترونية، البنيوية و المغناطيسية للسبائك الرباعية لهسلر (CoRuZrSi, CoRuZrSn). باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية مع الكمون الكامل (FP-LAPW) على أساس نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). قمنا بحساب هذه الخصائص ضمن تقريب التدرج المعمم (GGA) و التقريب المعدل لبيك جونسون (mBJ). الخصائص الهيكلية التي تم الحصول عليها بينت أن المركبين مستقران في الحالة الفيرومغناطيسية (FM) للنوع (Cu<sub>2</sub>MnAl) وأنها يتمتعان بصلابة قوية من خلال حساب كل من معامل الانضغاطية الخاص بهما. كما أظهرت الخصائص الإلكترونية التي تمت دراستها أن المركبات لها سلوك نصف معدني. نتائجا التي تم الحصول عليها لهذه الكميات تجعل هذه المركبات مرشحة جذابة للمواد المستخدمة في أجهزة spintronic .

**الكلمات المفتاحية:** نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT)، سبائك هسلر، نصف معدني

## Résumé

Le but de ce travail est l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques pour les alliages de Heusler quaternaires (CoRuZrSi, CoRuZrSn) en utilisant la méthode d'onde plane augmentée linéarisée avec un plein potentiel (FP-LAPW) basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons calculé ces propriétés dans l'approximation générale du gradient (GGA) et l'approximation modifiée de Breck-johnson (mBJ). Les propriétés structurales obtenus ont montrés que les deux composés sont stable a l'état ferromagnétique de type (Cu<sub>2</sub>MnAl) et qu'ils ont une forte ténacité en calculant leur résistance a la compression. Les propriétés électroniques étudiées ont montré que le composé a un comportement semi-métallique. Les résultats obtenus pour ces quantités font de ces composés des candidats intéressants pour les matériaux utilisés dans les dispositifs spintroniques.

**Les mots clés :** DFT, Alliage d'Heusler, Demi-métallique.

## Abstract

The goal of this work is the study of electronic, structural and magnetic properties of the quaternary Heusler alloy (CoRuZrSi, CoRuZrSn), using the linearized augmented plane wave method with a full potential (FP-LAPW) based on the density functional theory (DFT). We computed these properties within the general gradient approximation (GGA) and the modified Brick Johnson approximation (mBJ). The obtained structural properties showed that the two compounds are stable in the ferromagnetic state of the (Cu<sub>2</sub>MnAl) type and that they have strong hardness by calculating their compressibility coefficient. The electronic properties studied have also showed that the compound have a half-metallic behavior. Our obtained results for these quantities make these compounds attractive candidates for materials used in spintronic devices.

**The key words:** DFT, Heusler alloys, semi-mettalic.