



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



Faculté des Sciences et de la Technologie

Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme

De Master académique en

Filière : PHYSIQUE

Spécialité : NANO-PHYSIQUE

Présentée par: **Boubekeur Asma**

***Etude les propriétés structurales et électroniques des alliages
half-heusler des composées XZrAs (X=Cr, Mn, V)***

Soutenu le : /2023

Devant le Jury :

M ^r Boumia Lakhdar	Président	M.C.A. Université-Tissemsilt
M ^r Mokhtari Mohamed	Examineur	M.C.A. Université-Tissemsilt
M ^r .Dahmane Fethallah	Encadreur	Pr. Université-Tissemsilt
M ^{me} Zeffane Soumia	Co-Encadreur	Dr Université-Tissemsilt

Année universitaire:2022-2023

RESUME :

Ce mémoire aborde l'étude des aspects structurelles et électroniques des alliages half-Heusler contenant le composé $XZrAs$, en analysant l'impact des différents éléments de la composition X (Cr, Mn, V) et de la diversité des structures cristallines pour les types $(0; 1/2; 1/4)$, $(1/4; 0; 1/2)$, $(1/2; 1/4; 0)$ sur les propriétés physiques des alliages.

Le composé $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) est unique en son genre, car il présente une stabilité dans une structure cristalline spécifique mais il exhibe une nature half-métallique dans une autre structure cristalline. Cette variation distincte dans les propriétés physiques met en évidence l'originalité du composé et les interactions complexes entre les états électroniques.

Les faits saillants sont les résultats obtenus à l'aide de le code Wien2k en utilisant les approximations GGA (approximation généralisée du gradient) et FP-LAPW (fonctions d'onde, plans linéaires augmentés à plein potentiel) basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.

Le mémoire conclut en soulignant l'importance des futures études, telles que l'amélioration des propriétés cristallines et électroniques des alliages Heusler par des modifications de leur composition, ainsi que la nécessité de mener davantage de recherches pour comprendre les mécanismes électroniques des réactions de ces alliages et développer des modèles théoriques avancés pour prédire les propriétés physiques de ces matériaux.

ABSTRACT :

This dissertation addresses the study of the structural and electronic aspects of half-Heusler alloys containing the compound XZrAs, by analyzing the impact of different elements in the X composition (Cr, Mn, V) and the diversity of crystalline structures for types (0; 1/2; 1/4), (1/4; 0; 1/2), (1/2; 1/4; 0) on the physical properties of the alloys.

The XZrAs compound (X = Cr, Mn, V) is unique because it exhibits stability in a specific crystalline structure, but it shows a half-metallic nature in another crystalline structure. This distinct variation in physical properties highlights the uniqueness of the compound and the complex interactions between electronic states.

The main findings are the results obtained using the Wien2k code, employing the GGA (Generalized Gradient Approximation) and FP-LAPW (Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave) approximations based on the Density Functional Theory (DFT).

The dissertation concludes by emphasizing the importance of future studies, such as improving the crystalline and electronic properties of Heusler alloys through modifications in their composition. It also underscores the need for further research to understand the electronic mechanisms of reactions in these alloys and develop advanced theoretical models to predict the physical properties of these materials.

ملخص

يتناول هذا البحث دراسة الجوانب الهيكلية والإلكترونية لسبائك النصف-هوسلر ذات المركب $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) ، من خلال تحليل تأثير العناصر المختلفة في تركيبية وتنوع البنى البلورية للأنواع $(0; 2/1; 4/1)$ ، $(2/1; 0; 4/1)$ ، $(0; 4/1; 2/1)$ على الخواص الفيزيائية للسبائك.

يعتبر مركب $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) فريداً من نوعه، حيث يظهر استقراراً في بنية بلورية محددة ولكنه يظهر طبيعة نصف معدنية في بنية بلورية أخرى. يسلط هذا التباين المميز في الخصائص الفيزيائية الضوء على فريدة هذا المركب وعلى التفاعلات المعقدة بين الحالات الإلكترونية.

تم الحصول على النتائج بالاعتماد على برنامج $Wien2k$ و باستخدام تقريبات GGA (التقريب العام للتدرج) و $FP-LAPW$ (دوال الأسطح المموجة المتزايدة بشكل خطي) والمستندة إلى نظرية الكثافة الوظيفية DFT .

. يختتم هذا البحث بتسليط الضوء على أهمية الدراسات المستقبلية، مثل تحسين الخواص البلورية والإلكترونية لسبائك هوسلر من خلال تعديل تركيبها، وضرورة إجراء المزيد من البحوث لفهم آليات الاستجابة الإلكترونية لهذه السبائك و تطوير نماذج نظرية متقدمة لتوقع الخواص الفيزيائية لهذه المواد.

SOMMAIRE :

<i>Dédicace</i>	<i>I</i>
<i>Remerciements</i>	<i>II</i>
<i>Liste des abréviations</i>	<i>III</i>
<i>Liste des figures</i>	<i>IV</i>
<i>Liste des tableaux</i>	<i>V</i>
<i>Introduction générale</i>	<i>13</i>
 <i>Chapitre I : Généralités sur les alliages d'Heusler</i>	
<i>I-1 Introduction</i>	<i>16</i>
<i>I-2 Les types des alliages heusler</i>	<i>17</i>
<i>I-2-1 Full-heusler</i>	<i>17</i>
<i>I-2-2 Half-heusler</i>	<i>19</i>
<i>I-2-3 Heusler quaternaire</i>	<i>20</i>
<i>I-3 Half-métalliques ferromagnétiques</i>	<i>21</i>
<i>I-4 Règles de Slater-Pauling</i>	<i>22</i>
<i>I-5 Spintronique</i>	<i>24</i>
<i>I-5-1 les applications de spintronique</i>	<i>25</i>
<i>I-5-1-1 Magnéto-résistances géant</i>	<i>25</i>
<i>I-5-1-2 Magnéto-résistances tunnel</i>	<i>26</i>
<i>I-5-1-3 Mémoire magnétique à accès aléatoire</i>	<i>28</i>
<i>Conclusion</i>	<i>29</i>
 <i>Chapitre II : Résultats et discussions</i>	
<i>II-1 Introduction</i>	<i>31</i>
<i>II-2 Détails des calculés</i>	<i>31</i>
<i>II-3 Les propriétés structurales</i>	<i>31</i>
<i>II-3 Les propriétés électroniques</i>	<i>34</i>

<i>II-3-1 Structure de bandes</i>	35
<i>II-3-2 Densité d'états</i>	39
Conclusion générale	44
Références	46

DEDICACE :

*À TOUS LES PASSIONNES DE LA SCIENCE ET AUX CHERCHEURS AVIDE DE CONNAISSANCES,
A MES CHERS COLLEGUES QUI PARTAGENT MA PASSION, ET A MA FAMILLE AIMANTE QUI*

ME SOUTIENT SANS LIMITE, JE DEDIE CETTE DEDICACE EMPREINTE DE L'ECLAT SCIENTIFIQUE ET DE LA SPLENDEUR DES DECOUVERTES.

DANS LES CIEUX DE LA PHYSIQUE, NOUS VOLONS AVEC LES AILES DE LA CURIOSITE ET DE LA COMPREHENSION APPROFONDIE. NOUS PLONGEONS DANS LES PROFONDEURS DES ATOMES ET COMPRENONS LA NATURE DE L'UNIVERS GRACE A DES CHIFFRES ET A DES THEORIES AVANCEES. NOUS SOMMES DES PIONNIERS DU SAVOIR, CHERCHANT A REVELER LES SECRETS DE L'UNIVERS ET A BRISER LES BARRIERES DE LA GRAVITE SCIENTIFIQUE.

À MES RESPECTABLES PROFESSEURS, VOUS ETES DES PHARES DE LA CONNAISSANCE QUI ONT INSPIRE L'ESPRIT DE QUESTIONNEMENT ET DE DECOUVERTE EN MOI. GRACE A VOS CONSEILS PERSPICACES ET A VOTRE SOLIDE SOUTIEN SCIENTIFIQUE, J'AI PU REPOUSSER LES LIMITES ET DECOUVRIR MES VERITABLES CAPACITES. JE VOUS REMERCIE D'AVOIR ALLUME LA FLAMME DE LA SCIENCE EN MOI ET DE M'AVOIR GUIDE VERS L'EXCELLENCE.

ET A MES CHERS COLLEGUES, VOUS ETES MES COMPAGNONS D'EXPLORATION ET DE DEFIS COMMUNS, NOUS FORMONS UNE EQUIPE QUI MAITRISE LE LANGAGE DES CHIFFRES ET DES EXPERIENCES. AVEC VOUS, LA SCIENCE EST DEVENUE PLUS EXCITANTE ET CAPTIVANTE. NOUS PARTAGEONS NOS IDEES ET COLLABORONS POUR NOUS INSPIRER MUTUELLEMENT ET REALISER DES EXPLOITS SCIENTIFIQUES EXTRAORDINAIRES.

ET A MA FAMILLE BIEN-AIMEE, VOUS ETES LES AMES QUI NOURRISENT MA LUEUR SCIENTIFIQUE ET ME DONNE LA FORCE ET LE SOUTIEN NECESSAIRES. GRACE A VOTRE AMOUR INFINI ET A VOTRE SOUTIEN CONSTANT, J'AI LE COURAGE DE RELEVER LES DEFIS SCIENTIFIQUES ET DE SURMONTER LES DIFFICULTES. VOUS ETES DES ETOILES QUI ILLUMINENT MON CIEL ET ME POUSSENT A ATTEINDRE DES SOMMETS.

DANS CETTE DEDICACE, J'EXPRIME MA PROFONDE GRATITUDE ENVERS VOUS TOUS. VOUS REPRESENTEZ L'ECLAT DE LA SCIENCE DANS MA VIE, ET VOUS ETES LES FONDEMENTS DE MON EPANOUISSEMENT EN TANT QUE SCIENTIFIQUE.

REMERCIEMENTS :

Je remercie Allah pour ses grandes bénédictions et sa grâce qui sont innombrables, il est le généreux bienfaiteur qui m'a donné l'opportunité d'apprendre et de me développer dans mon domaine de la physique, et m'a

accordé la capacité de découvrir les secrets de l'univers et de ses propriétés physiques.

*Je remercie sincèrement mon encadrant Monsieur **Dahmane Fathallah** et madame **zeffane soumia** pour leur assistance et conseils durant mon mémoire en physique.*

*En outre, je voudrais exprimer mes remerciements particuliers au professeur Monsieur **Boumia Lakhdar** et Monsieur **Mokhtari Mohamed** qui discute de ma thèse et pour leur présence distinguée aujourd'hui.*

*De plus, je tiens à remercier tout particulièrement mes distingués professeurs **Bouhekka Ahmed** et **Besahraoui Fatiha** qui m'ont apporté des connaissances et une éducation tout au long de mes études.*

Enfin j'aimerais exprimer ma profonde gratitude envers tous ceux qui ont contribué à cette aventure, mes remerciements les plus sincères vont à vous tous pour votre soutien indéfectible et votre contribution inestimable à ce parcours académique.

BOUBEKEUR ASMA

LISTE DES ABREVIATIONS :

HH: Demi -Heusler (Half-Heusler).

FH: Heusler Complete (Full-heusler).

FP-Lapw: Onde Plane Augmentée Linéarisée avec potentiel complet (Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave).

GGA: Approximation du Gradient Générale (Generalized Gradient Approximation).

CCF: Cubique Face Centré (Cubic Face-Centered).

HM: Demi Métallique (Half-Metallic).

FM: Ferromagnétique.

SP: Slater Pauling.

GMR: magnéto-résistance géante.

TMR: magnéto-résistance tunnel.

CPP-GMR: Cubic Close-packed Giant Magnéto-résistance.

MRAM: Mémoire vive magnéto-résistive (Magnetoresistive Random-Access Memory).

MTJ: Jonction tunnel magnétique.

DOS: Densité d'Etats (Density of states).

PDOS: Densité d'Etats Partielle.

BV: Bande de valence.

BC: Bande de conduction.

LISTE DES FIGURES :

Figure I-1 : tableau périodique d'alliages heusler.....16

Figure I-2 : La structure de L21.....17

Figure I-3: la structure full-heusler.....18

<i>Figure I-4 : La différence entre la structure full-Heusler et heusler inverse.....</i>	<i>18</i>
<i>Figure I-5 : La structure half-Heusler.....</i>	<i>19</i>
<i>Figure I-6 : Différentes types des structures heusler.....</i>	<i>20</i>
<i>Figure I-7 : Etats électroniques et le flux de charges électriques dans les ferromagnétiques et les ferromagnétiques half-métalliques.....</i>	<i>22</i>
<i>Figure I-8 : Courbe de Slater Pauling.....</i>	<i>23</i>
<i>Figure I-9 : Manifestations spintroniques du spin électroniques en plus de la charge électrique.....</i>	<i>25</i>
<i>Figure I-10 : Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante. (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.....</i>	<i>26</i>
<i>Figure I-11 : Illustration du GMR dans deux états a) parallèle b) anti parallèle.....</i>	<i>27</i>
<i>Figure I-12: Schéma de la MRAM.....</i>	<i>28</i>
<i>Figure II-1 : La structure cristalline du XZrAs à chaque type.....</i>	<i>33</i>
<i>Figure II-2: Les énergies totales calculées pour l'alliage XZrAs (X=Cr,Mn,V) en fonction des volumes.....</i>	<i>34</i>
<i>Figure II-3 : Structures des bandes de HH XZrAs (X=Cr,Mn,V) du type 1.....</i>	<i>37</i>
<i>Figures II-4 : Structures des bandes de HH XZrAs (X=Cr,Mn,V) du type 2.....</i>	<i>38</i>

Figure II-5 : La densité d'état totale et partielle de CrZrAs.....41

Figure II-6 : La densité d'état totale et partielle de MnZrAs.....41

Figure II-7 : La densité d'état totale et partielle de VZrAs.....42

LISTE DES TABLEAUX :

Tableau II-1 : Les différents types de la structure XZrAs.....31

*Tableau II-2 : L'énergie d'équilibre (eV), paramètre de maille $a(\text{Å})$,
module de compressibilité $B(\text{GPa})$ et sa première dérivée B' des
alliages XZrAs ($X= \text{Cr}, \text{Mn}, \text{V}$).....33*

*Tableau II-3 : les moments magnétiques des types 1 et 2 du composant
XZrAs.....35*

Introduction

générale

Introduction générale

INTRODUCTION GENERALE :

Depuis l'Antiquité, l'homme s'est appuyé sur les matériaux disponibles dans la nature tels que la pierre, le bois, le cuir et le fer, et leur utilisation était limitée en raison de leur rareté et de leur difficulté à être transformés et façonnés.

Avec le développement de la technologie et des sciences des matériaux, de nouveaux matériaux ont été découverts et développés, qui se caractérisent par des propriétés mécaniques et physiques supérieures, tels que les matériaux plastiques, métalliques et composites.[1] Au cours des dernières décennies, les matériaux modernes ont connu une évolution significative dans les domaines des sciences de l'ingénierie, de la chimie et de la physique, où de nouveaux matériaux ont été découverts et les propriétés des matériaux existants ont été améliorées.[2]

Des matériaux nano, polymères et carbonés ont été développés, ainsi que des matériaux aux propriétés uniques tels que les matériaux intelligents qui répondent aux conditions environnantes, et les matériaux biologiques utilisés en médecine et en thérapie. Par exemple, les matériaux nano peuvent être utilisés dans la production d'énergie solaire, où ils contribuent à améliorer l'efficacité des panneaux solaires et à réduire les coûts. [3]

En ce qui concerne les matériaux biologiques, ils se distinguent par leurs propriétés uniques qui aident au traitement et au diagnostic, tels que les médicaments clonés, les organes clonés et les tissus clonés.

Ces matériaux contribuent à améliorer la qualité de vie de nombreux patients atteints de maladies chroniques. [4]

Parmi les matériaux modernes importants qui ont récemment fait leur apparition, il y a les alliages Heusler. Ces alliages sont idéaux pour une utilisation dans les industries de l'ingénierie, spatiale et médicale, car ils se caractérisent par leur résistance élevée à la chaleur, à la corrosion, à la corrosion chimique et à l'exposition aux rayonnements, ainsi que leur légèreté et leur facilité de façonnage et de fabrication. Les alliages Heusler

Introduction générale

sont composés d'un groupe de métaux, y compris le nickel, le chrome, le fer et le molybdène, et leur composition varie en fonction de l'utilisation prévue, et ils sont utilisés dans des industries telles que l'aéronautique, l'énergie nucléaire, la pétrochimie et les dispositifs médicaux.[5]

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés électroniques et cristallines d'alliages demi-Heusler $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) de trois types différents, à travers le code wien2k basé sur DFT et en utilisant les approximations GGA, FP-Lapw.

Ce travail est composé de deux chapitres dont le premier porte sur les généralités des alliages Heusler et leurs applications, le second sur les résultats et discussion de l'étude de notre composé et enfin une conclusion résumant les informations les plus importantes obtenues.

Chapitre I

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

I-1 INTRODUCTION:

En 1903, l'un des matériaux les plus importants qui a attiré l'attention des scientifiques a été découverte en raison de ses propriétés physiques et chimiques, elle se comporte comme un matériau ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs ne soient pas, ce composé s'appelle l'alliage heusler du nom de son découvreur l'ingénieur allemand Friedrich Heusler et qui a étudié l'alliage (Cu₂MnSb). [6]

Ce type d'alliage peut avoir le comportement des demi-métaux (HM), des semi-conducteurs (SC) [7], des supraconducteurs et bien d'autres. [8]

Aujourd'hui, il comprend plus de 1000 composés [9] de ses trois types : les half-heusler (HH) de composition XYZ, les full-Heusler (FH) de composition X₂YZ et les heusler quaternaires de composition XX'YZ ; [10] avec X et Y représentent des métaux de transitions ou terres rares, [11] et Z est un élément des colonnes (III, IV et V) du tableau périodique [12], Comme le montre la figure I-1. [13]

Le tableau périodique ci-dessous est coloré pour indiquer les éléments utilisés dans les alliages Heusler. Les éléments sont classés en fonction de leur type d'alliage :

- Full Heusler (X₂YZ) :** Éléments colorés en orange (Cu, Ni, Co, Fe, Mn, Cr, V, Ti, Zr, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn).
- Half Heusler (XYZ) :** Éléments colorés en vert (Al, Si, P, S, Cl, Ar, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn).
- Autres éléments :** Éléments colorés en bleu (Li, Be, Na, Mg, K, Ca, Sc, Y, Zr, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn).

Le tableau inclut également des légendes pour les types d'alliages et des données de base pour les éléments (numéro atomique, symbole, électro-négativité).

Figure I-1 : Tableau périodique d'alliages heusler.

Le principal domaine d'application de ces alliages est la spintronique grâce à laquelle la polarisation de spin peut atteindre 100% sur le niveau de Fermi à la température de Curie relativement élevée.

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

I-2 LES TYPES DES ALLIAGES HEUSLER :

I-2-1 Full-heusler :

Le composé original qui a été découvert et étudié en premier, après quoi d'autres types ont été développés, de la formule chimique X_2YZ et de la structure $L2_1$ ordonnés avec stœchiométrie 2: 1: 1 et la structure cristallographique CCF (groupe d'espace $Fm\bar{3}m$ (225)) selon le nombre d'électrons de valence et la règle de Slater-Pauling, [14] [15] et qui est formée de la combinaison ordonnée de deux alliages B2 binaires XY et XZ ; il y a deux sous-réseaux dans la structure $L2_1$: Zink-Blend (ZnS) covalent comme un entre l'un des atomes X et l'élément principal du groupe Z , et Rock-Salt ($NaCl$) ionique comme un entre les plus électropositifs Y et les éléments Z qui sont coordonnés des sites octaédrique, Le deuxième élément X occupe le reste des vides tétraédriques, [16] comme la figure I-2 [17] où les atomes X , Y et Z occupent les positions de Wyckoff ; dans ce prototype les atomes X occupent la position 8c ($1/4, 1/4, 1/4$), les atomes Y sont situés aux positions 4a ($0, 0, 0$) et Z aux 4b ($1/2, 1/2, 1/2$), [18] comme la figure I-3 [19].

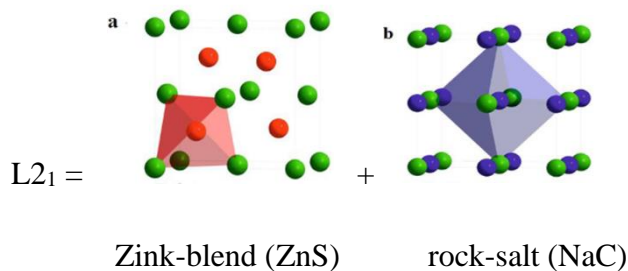


Figure I-2-1: La structure $L2_1$.

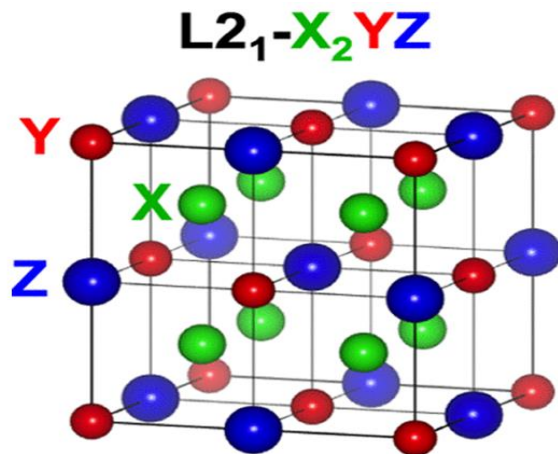


Figure I-3: la structure cristalline des alliages full-heusler

Dans le cas de la valence de l'atome de métal de transition X est inférieure à la valence de l'atome de métal de transition Y donne Heusler inverse de structure Xa (groupe d'espace F43m (216)) [20] voir la figure I-4 [21]

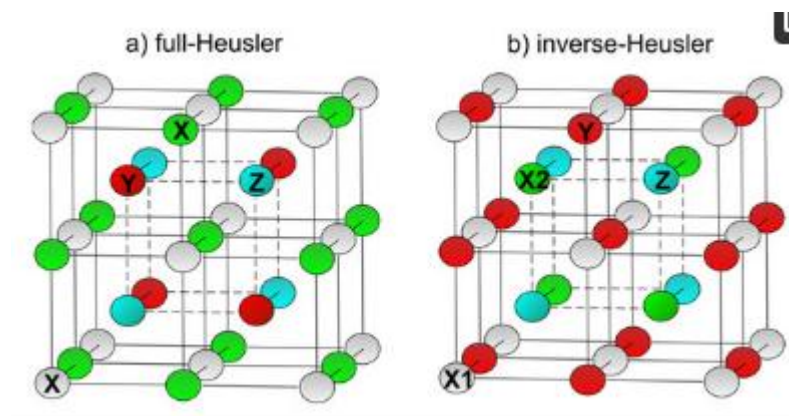


Figure I-4 : La différence entre la structure des alliages full-heusler et heusler inverse.

I-2-2 Half-Heusler :

Ce type d'alliages est le plus important en raison de son efficacité dans le domaine de la conversion de l'énergie thermoélectrique à cause de ses éléments constitutifs peu coûteux qui sont présents dans la terre et sa Stabilité thermique et mécanique ;[22] Il est de nature ternaire qui participent de fortes similitudes structurales avec les semi-conducteurs binaires de zinc blende III-V, Cristallographiquement, ce réseau comprend

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

des atomes X et Z, avec des atomes Y supplémentaires insérés dans les sites octaédriques.[23]

La composition chimique générale des phases HH est XYZ ; de la structure $C1_b$ ordonnés avec stoechiométrie 1: 1: 1 (groupe d'espace F43m N°216) et ce type de structure peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (CCF), dont chacun est occupé par les atomes X, Y et Z selon les positions de Wyckoff suivantes : 4a (0,0,0), 4b (1/2, 1/2, 1/2) et 4c (1/4, 1/4, 1/4, 1/4).[24][25] Voir la figure I-5 [26]

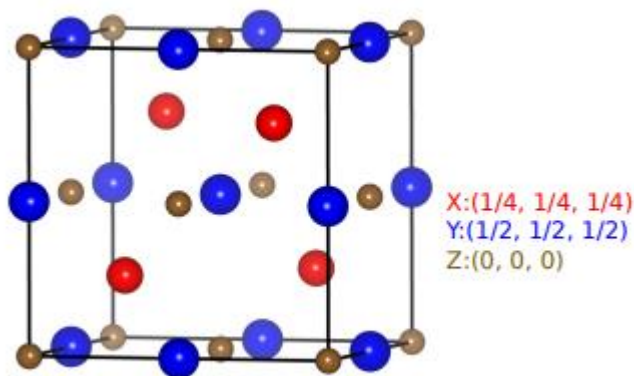


Figure I-5 : La structure cristalline des alliages half-Heusler.

I-2-3 Heusler quaternaire :

Une autre famille d'alliages heusler, qui dans leur composition chimique contiennent quatre atomes différents avec la composition générale $XX'YZ$ et X, X', Y, Z occupent les positions atomiques 4c (1/4,1/4,1/4) ,4d (3/4,3/4,3/4), 4b (1/2,1/2,1/2) et 4a (0,0,0), respectivement, il cristallise dans le groupe d'espace cubique F-43m (N°216) [27] [28]. La figure I-6 montre la différence entre les différents types d'alliage heusler.[29]

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

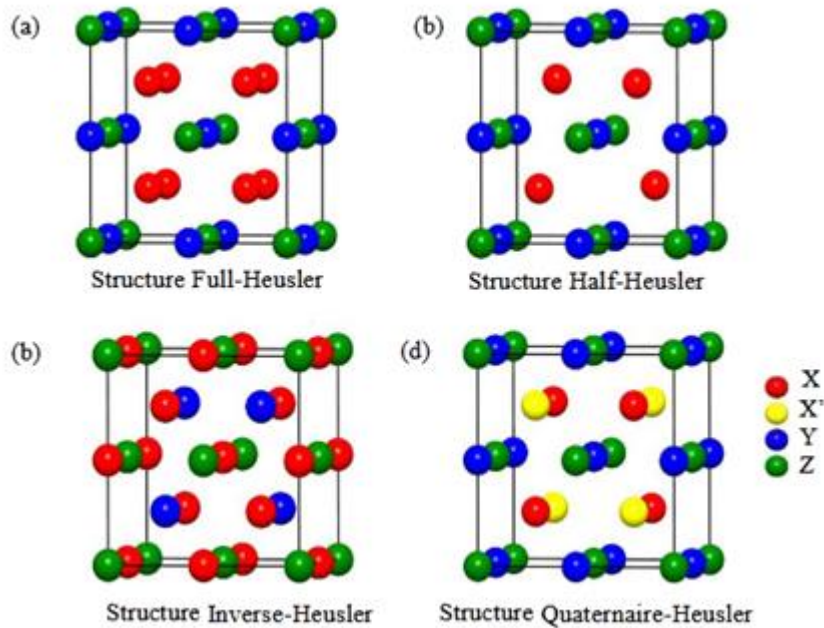


Figure I-6 : Différents types des structures heusler.

I-3 HALF-METALLIQUES FERROMAGNETIQUES :

Il existe un mécanisme qui permet de donner à un matériau solide qui a la capacité de s'aimanter en cas de champ magnétique, une aimantation permanente qui est d'une plus importance dans la technologie moderne

L'efficacité de cette propriété est caractérisée par une température spécifique appelée température de Curie ; il a ce qu'on appelle l'interaction d'échange qui se produit entre les moments magnétiques qui s'alignent parallèlement les uns aux autres. [30][31]

Parmi les matériaux ferromagnétiques les plus importants sont les demi-métaux (oxydes, sulfates, alliages heusler) qui agissent comme conducteur, isolant électrique ou semi-conducteur et il existe une forte relation entre eux de sorte que les demi-métaux sont caractérisés par la caractéristique que la moitié des bandes électroniques sont riches en électrons et l'autre moitié en sont vides, de sorte que ces matériaux deviennent magnétiques lors de la circulation des électrons qui remplissent la bande vide.

Les demi-métaux sont des matériaux idéaux dans le domaine émergent de l'électronique de spin, qui est l'une des applications potentielles pour l'interaction entre la supraconductivité et les matériaux à polarisation de spin. Par conséquent, il est souhaitable d'obtenir une température élevée de polarisation de spin pour les matériaux

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'Heusler

en contact avec des matériaux supraconducteurs, régions et c'est ce qui distingue les demi-métaux, car ce sont des aimants à rotation complète. [32]

De Groot et al sont les premiers à présenter les ferromagnétiques demi-métalliques comme ayant 100 % de polarisation en spin des électrons conducteurs grâce à la propriété caractéristique des demi-métaux qu'ils contiennent deux comportements : un comportement métallique pour un spin d'électron et un comportement isolant pour l'autre, qui rend la densité électronique au niveau de Fermi complètement polarisée. [33] La figure I-7 un exemple pour les états électroniques et le flux de charges électriques dans les ferromagnétiques et les ferromagnétiques demi-métalliques d'un alliage Heusler. [34]

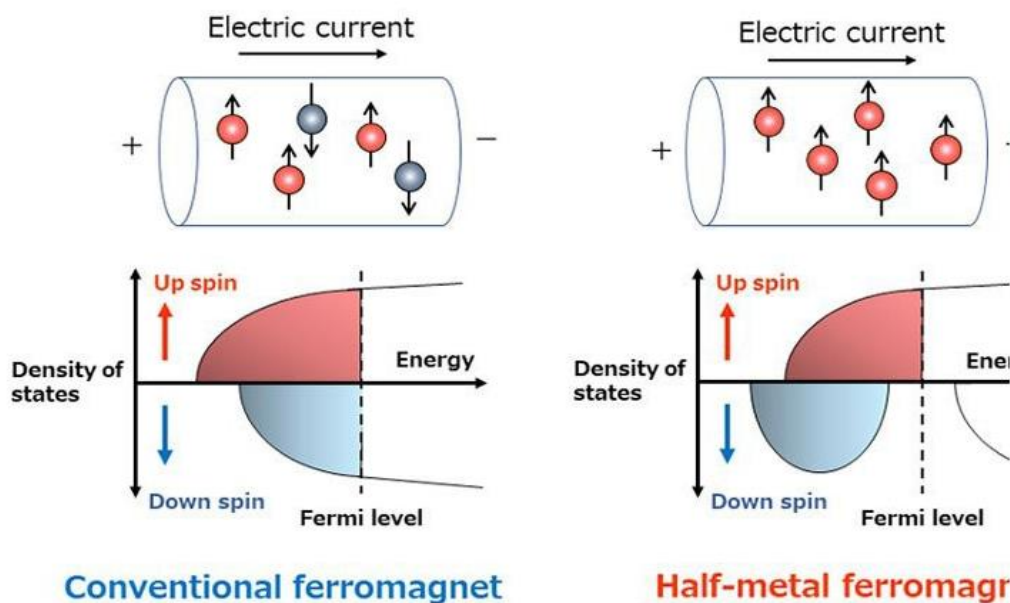


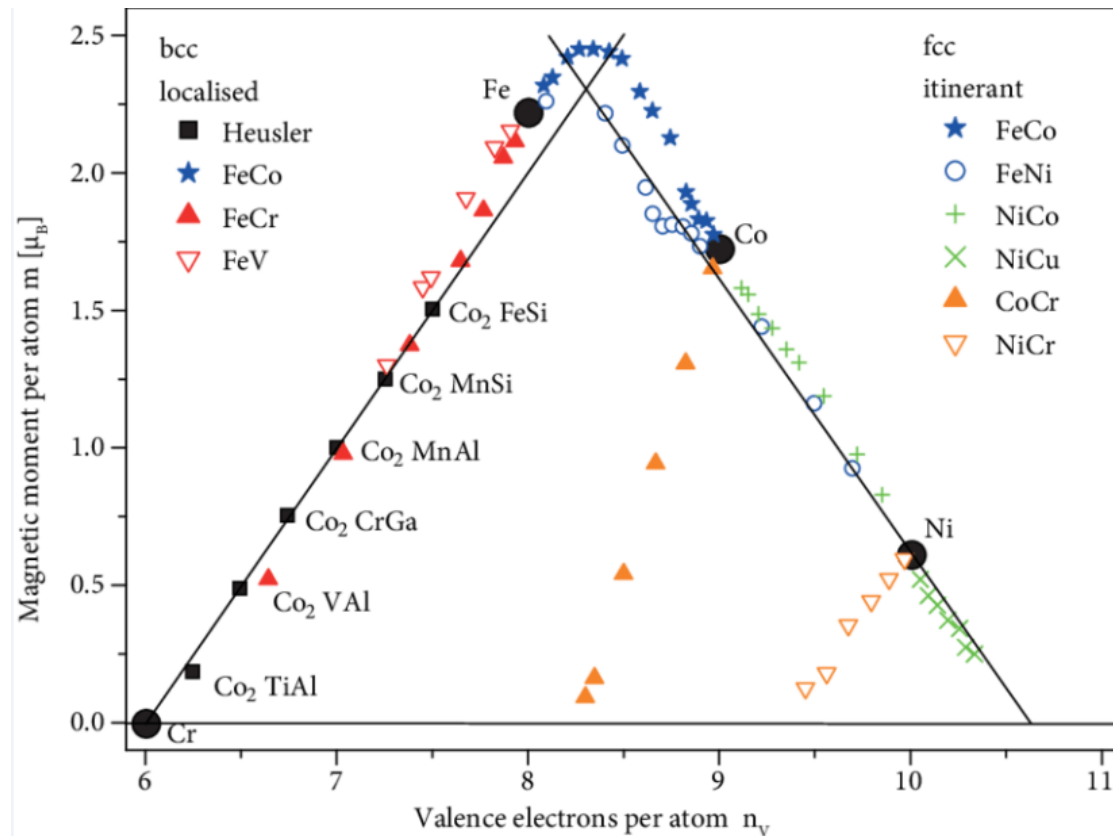
Figure I-7 : Etats électroniques et le flux de charges électriques dans les ferromagnétiques et les ferromagnétiques demi-métalliques.

Ainsi, il a une grande crédibilité dans la recherche de nouveaux matériaux tels que les alliages Heusler, et est considéré comme l'une des classes de matériaux les plus prometteuses pour réaliser des applications électroniques avancées dans le futur.

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

I-4 REGLES DE SLATER-PAULING :

Les règles de Slater-Pauling sont une courbe qui montre la nature magnétique de base des métaux de transition et de leurs alliages, et c'est à partir de la découverte des deux scientifiques James Slater et John Pauling [35], où ils ont montré que lorsque nous ajoutons un électron de valence dans le composé, il n'occupe les états de spin down qu'avec une diminution totale du couple magnétique d'environ $1\mu_B$ dans le cas des alliages magnétiques comme les alliages heuslerdemi-métalliques ; voir la figure I-8.[36]



Chapitre I : Généralités sur les alliages d'Heusler

HH : $M_t = Z_t - 18$

HF : $M_t = Z_t - 24$

On peut dire à propos de cette équation que l'aimant de spin total dans la cellule unitaire M_t est considéré comme une fonction du nombre total d'électrons de valence Z_t . [37]

Ainsi, les règles de Slater-Pauling sont un outil puissant pour étudier ce type d'alliage.

I-5 SPINTRONIQUE :

La spintronique c'est une électronique qui exploite la charge et le spin des électrons. La date de sa découverte est attribuée à l'année de publication de la découverte par les scientifiques français Albert Fert et l'allemand Peter Grunberg. Liés à la résistance magnétique géante en 1988, ils ont reçu le prix Nobel de physique pour cette découverte en 2007. [38] Cette propriété repose sur le principe d'exposer une résistance électrique à un champ magnétique externe pour la convertir en un matériau avec des couches magnétiques et non magnétiques. [39]

La spintronique est considérée comme l'une des dernières technologies dans les sciences de l'électronique qui utilise la rotation rotative des électrons pour transférer, stocker et traiter des informations et comprend des matériaux spéciaux tels que des matériaux demi-métalliques.

Il a des caractéristiques qui lui permettent de consommer moins d'énergie, ce qui en fait une technologie idéale pour développer des appareils très efficaces et de meilleures performances dans divers domaines, et il a des vitesses élevées dans les opérations de calcul et de traitement, ce qui le rend éligible au développement de technologies en future. En général, cette technique est basée sur l'utilisation des propriétés de spin des électrons, qui permettent de déterminer la direction de leur spin, permettant un contrôle précis du flux d'électrons et une meilleure orientation. Voir la figure I-9. [40]

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

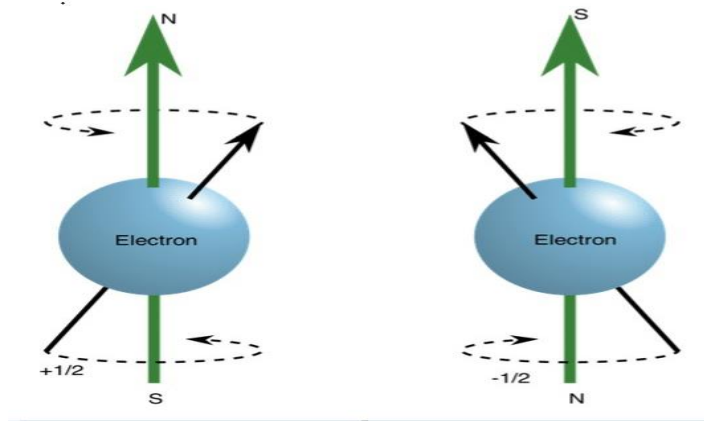


Figure I-9 : Manifestations spintroniques du spin électroniques enplus de la charge électrique.

I-5-1 les applications de spintronique :

La technologie spintronique a des applications dans de nombreux domaines, notamment:

L'électronique grâce à sa capacité à contrôler le mouvement des électrons et à les diriger et les stocker avec précision en mettant à jour les disques durs avec une plus grande capacité et une vitesse de transfert de données plus élevée et en rendant les capteurs plus sensibles et précis pour détecter le champ magnétique, GMR, TMR, MRAM.

Sécurité par le développement de systèmes de vérification d'identité et de reconnaissance d'empreintes digitales

Médical, où il a développé des dispositifs médicaux précis pour détecter les cellules cancéreuses et les tumeurs. [41]

I-5-1-1 Magnétorésistances géant

Le GMR est un phénomène de variation de la résistance d'un matériau lorsqu'un champ magnétique externe lui est appliqué.

Le GMR dépend de la diffusion basée sur le spin des électrons à la surface des domaines magnétiques, et cela est principalement évident à l'interface entre le dépôt magnétique et la matrice non magnétique dans le cas des alliages granulaires.

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

La technologie GMR est utilisée dans les appareils électroniques modernes tels que les disques durs, elle est également utilisée pour lire les données stockées sur les disques durs et mesurer les champs magnétiques avec une grande efficacité.

Spintronique utilise la magnétorésistance géante pour améliorer l'efficacité du contrôle dans les circuits électroniques et développer des capteurs modernes et des dispositifs informatiques quantiques. [42] voir la figure I-10 [43]

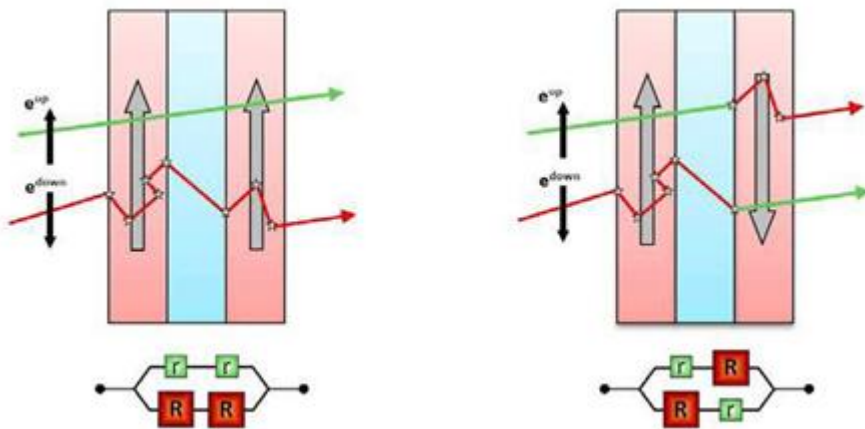


Figure I-10 : Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante. (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.

I-5-1-2 Magnétorésistances tunnel :

C'est l'un des phénomènes qui ont contribué à la croissance du domaine de l'électronique submicronique. Sa théorie a été proposée pour la première fois en 1975 par le scientifique Michel Julliere. Il a suggéré que le courant de tunnel doit être proportionnel à la densité des états électroniques du côté émetteur de la barrière et à la densité des états électroniques du côté récepteur de la barrière, qui peut être formulée dans l'équation suivante :

$$G_P = G_{\uparrow\uparrow} + G_{\downarrow\downarrow}$$

$$G_{AP} = G_{\uparrow\downarrow} + G_{\downarrow\uparrow}$$

Avec :

G_p : La densité statistique des molécules à rotation semi-fermionique dans la substance,

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

GAP : L'écart entre deux bandes d'énergie pour les électrons dans le dispositif,

$G\uparrow\uparrow$: La densité statistique des molécules à rotation semi-fermionique up-up

$G\downarrow\downarrow$: La densité statistique des molécules à rotation semi-fermionique down-down

$G\uparrow\downarrow$: Dans les deux conducteurs où les électrons coulent du pôle magnétique up au pôle magnétique down.

$G\downarrow\uparrow$: Dans les deux conducteurs où les électrons coulent du pôle magnétique down au pôle magnétique up, La figure I-11 le montre. [44]

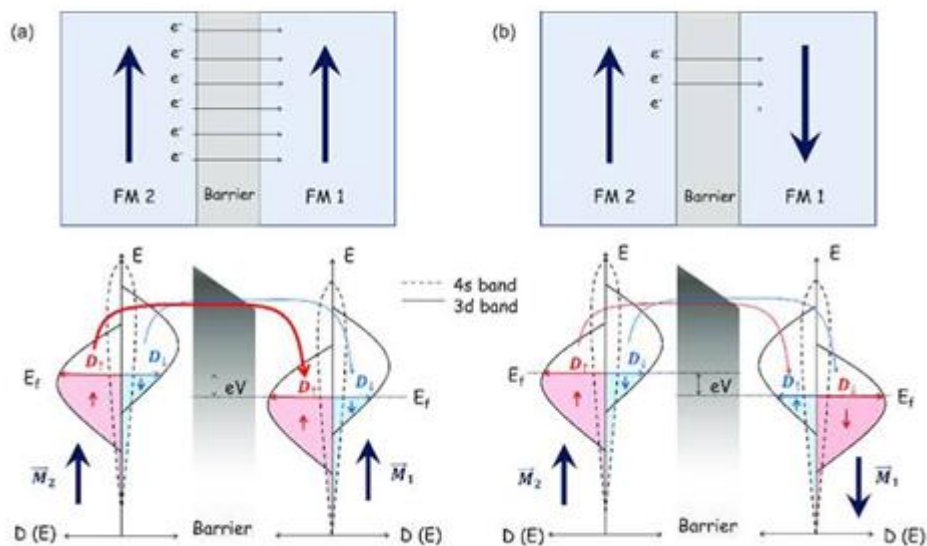


Figure I-11 : Illustration du TMR dans deux états a) parallèle b) anti parallèle.

TMR est géométriquement similaire à CPP-GMR, où la couche d'espacement métallique non magnétique est remplacée par un isolant ou un semi-conducteur. Elle repose sur la densité d'énergie de Fermi des états de spin magnétiques du fer, en l'absence de bandes de Fermi dans l'isolant, ce qui nous permet de réaliser des capteurs de lecture de petite taille lorsque le courant circule perpendiculairement aux couches. [45]

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'heusler

TMR est utilisé pour détecter la différence de résistance entre les états de spin parallèles et antiparallèles, et elle est particulièrement appropriée pour les capteurs de petite taille, ce qui en fait l'une des applications les plus importantes de la spintronique.

I-5-1-3 Mémoire magnétique à accès aléatoire :

La MRAM (mémoire RAM magnétique) utilise une combinaison d'un dispositif résistant à la magnétisation et d'une matrice de sélection à base de silicium. Elle se distingue par sa stabilité, sa faible consommation d'énergie, sa capacité illimitée en lecture et écriture. La MRAM est composée d'un croisement de jonction tunnel magnétique (MTJ) connecté à un transistor de sélection ;[46] La figure 5-12.[47]

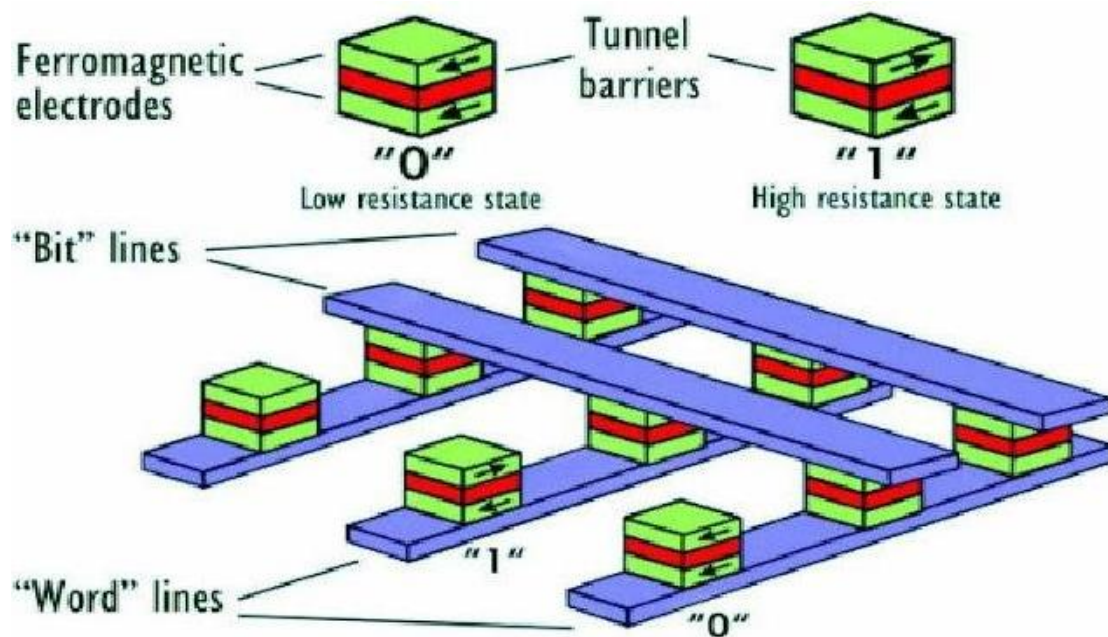


Figure I-12: Schéma de la MRAM.

Chapitre I : Généralités sur les alliages d'Heusler

CONCLUSION:

Dans ce chapitre nous avons identifié différents types d'alliages Heusler, y compris les half-Heusler qui sont de nature ternaire ferromagnétique, half-métalliques, qui en font des matériaux d'une grande importance dans divers domaines d'application technologique, notamment l'électronique, la conversion d'énergie, et le contrôle de la rotation libre des matériaux magnétiques.

Nous avons également observé leur utilisation efficace dans des domaines tels que l'électronique de pointe, les capteurs électroniques, le stockage et la conversion d'énergie, le contrôle de la rotation libre, ainsi que dans le développement de technologies de spintronique.

Chapitre II

Chapitre II : Résultats et discussions

II-1 INTRODUCTION:

Nous avons utilisé le programme Wien2k pour calculer les propriétés structurales et électroniques dans la phase ferromagnétique des alliages HH à base sur XZrAs (X=Cr, Mn, V), Nous avons basé notre approche sur la théorie DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité) en utilisant l'approximation GGA (Approximation du gradient généralisé) et la technique FP-LAPW (Onde plane augmentée linéarisée à potentiel total) pour représenter les fonctions électroniques.

II-2 DETAILS DES CALCULES:

Nous avons commencé le processus de calcul en préparant le fichier d'entrée nécessaire pour le programme Wien2k, où nous avons défini la structure cristalline du matériau et spécifié des informations telles que la maille cristalline, les types d'atomes et leurs emplacements, et après avons fixée l'intégration de la zone de Brillouin à 500 points.

Nous avons étudié les composés XZrAs selon 3 types présentés dans le tableau II-1 suivant :

Tableau II-1 : Les différents types de la structure XZrAs.

Les types	Type 1	Type 2	Type 3
XZrAs	(0; 1/2; 1/4)	(1/4; 0; 1/2)	(1/2; 1/4; 0)

Après cela, nous avons calculé les propriétés structurales et électroniques du matériau et avons discuté ses résultats obtenus.

II-3 LES PROPRIETES STRUCTURALES:

Dans le but de déterminer les propriétés structurales est essai de stabilité composites et de trouver les éléments suivant:le paramètre de maille a_0 , le module de compressibilité B_0 et sa dérivée, et E_0 l'énergie d'équilibre qui sont déterminée l'équation d'état de Murnaghan II-1 en dessous. [48]

Chapitre II : Résultats et discussions

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

Avec :

E (V): L'énergie totale,

E₀: L'énergie d'équilibre,

B: Le module de compressibilité,

B': La première dérivée du module de compressibilité.

V: le volume de la maille unitaire,

V₀: Le volume d'équilibre,

Et

$$V = V_0 \left(1 + \frac{B'}{B} P \right)^{-1/B'} \quad \text{II-2}$$

Le module de compressibilité B est défini par :

$$B = V \frac{d^2 E}{dV^2} \quad \text{II-3}$$

Nous pouvons résumer les résultats et les structures cristalline de l'optimisation dans le tableau II-2 et la figure II-1 respectivement ; ci-dessous :

Chapitre II : Résultats et discussions

Tableau II-2 : L'énergie d'équilibre (eV), paramètre de maille $a_0(\text{Å})$, module de compressibilité B (GPa) et sa première dérivée B' des alliages $XZrAs$ ($X= Cr, Mn, V$)

composants	Types	$a_0(\text{u.a})$	$E_0(\text{eV})$	$B(\text{GPa})$	B'
CrZrAs	Type 1	6,1363	-13822,416018	108,1971	4,3743
	Type 2	6,1029	-13822,374263	103,9595	4,6632
	Type 3	6,4205	-13822,295143	70,7605	4,0735
MnZrAs	Type 1	6,1225	-14037,986131	112,5804	4,5469
	Type 2	5,9941	-14037,973419	113,1019	5,0870
	Type 3	6,3560	-14037,867956	79,5765	4,7852
VZrAs	Type 1	6,1069	-13619,298125	127,8272	5,8083
	Type 2	6,2231	-13619,286070	92,6317	4,2374
	Type 3	6,4092	-13619,158993	73,4134	4,2193

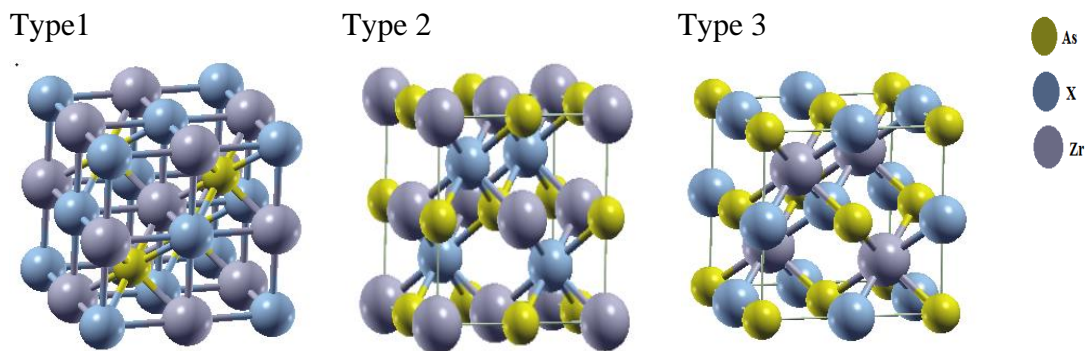


Figure II-1 : La structure cristalline du $XZrAs$ à chaque type

Chapitre II : Résultats et discussions

Afin d'obtenir le type d'alliage HH de composant XZrAs le plus stable, nous avons illustré les courbes de variation de l'énergie totale en fonction du volume dans la figure II-2 ci-dessous.

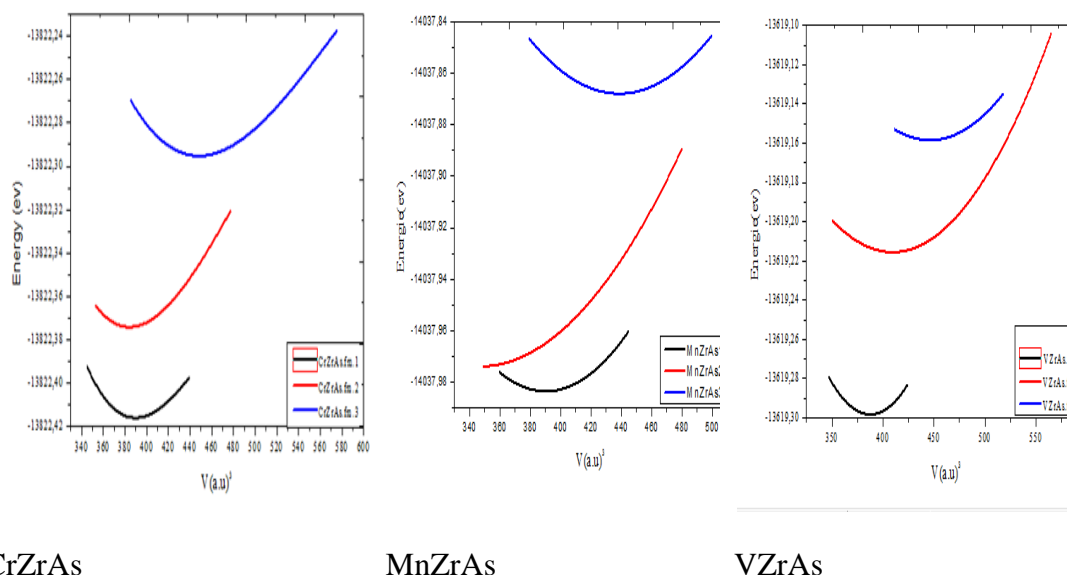


Figure II-2: Les énergies totales calculées pour l'alliage XZrAs (X= Cr,Mn,V) en fonction des volumes.

D'après les courbes présentées au-dessus, on remarque que les calculs magnétiques des types 1 toujours donne les valeurs de l'énergie les plus basses ; que veux dire les types 1 d'alliage HH des composant CrZrAs, MnZrAs, VZrAs est le plus stable.

II-4 LES PROPRIETES ELECTRONIQUES :

L'électronique est une branche de la physique qui étudie le comportement des électrons dans les matériaux. Dans le cadre de cette étude, nous nous concentrons sur les aspects électroniques des composés CrZrAs, MnZrAs et VZrAs.

La structure de bande et la densité d'états sont deux aspects importants de l'électronique de l'état solide, et sont essentiels pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux.

Chapitre II : Résultats et discussions

Nous résumerons également les résultats des moments magnétiques dans le tableau II-3 ci-dessous pour les relier étroitement aux propriétés électroniques du matériau étudié. En effet, les moments magnétiques sont directement liés à la rotation et au mouvement des électrons dans la structure cristalline. Par conséquent, l'étude des moments magnétiques peut fournir des informations sur la structure de bande électronique, la densité d'états et les interactions électroniques dans le matériau. Ainsi, l'analyse des moments magnétiques peut être utilisée comme un outil important pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux magnétiques.

Nous avons étudié ces propriétés dans les deux premiers types, où les matériaux étudiés étaient plus stables.

Tableau II-3 : les moments magnétiques des types 1 et 2 du composant XZrAs

Composants	CrZrAs		MnZrAs		VZrAs	
	Type 1	Type 2	Type 1	Type 2	Type 1	Type 2
MM totale	2,562	3,003	2,645	2,000	2,832	3,998

Nous avons noté dans le tableau ci-dessus que les moments magnétiques du second type sont des nombre presque entiers, ce qui indique la présence de la demi-métallicite.

II-4-1 Structure de bandes :

La structure de bande est un concept clé dans l'étude des propriétés électroniques des matériaux. Elle décrit la relation entre l'énergie et la quantité de mouvement des électrons dans un matériau solide. La bande de valence et la bande de conduction sont deux bandes électroniques importantes qui sont séparées par une bande interdite ou "gap". Les électrons dans la bande de valence sont responsables des liaisons chimiques et sont "liés" au noyau atomique, tandis que les électrons dans la bande de conduction ont suffisamment d'énergie pour se déplacer librement dans le matériau.

Le niveau de Fermi est un autre concept important dans la structure de bande, qui représente l'énergie d'un électron qui a une probabilité de 50% d'être occupé à une température donnée. Il s'agit essentiellement de l'énergie à laquelle se trouve la frontière

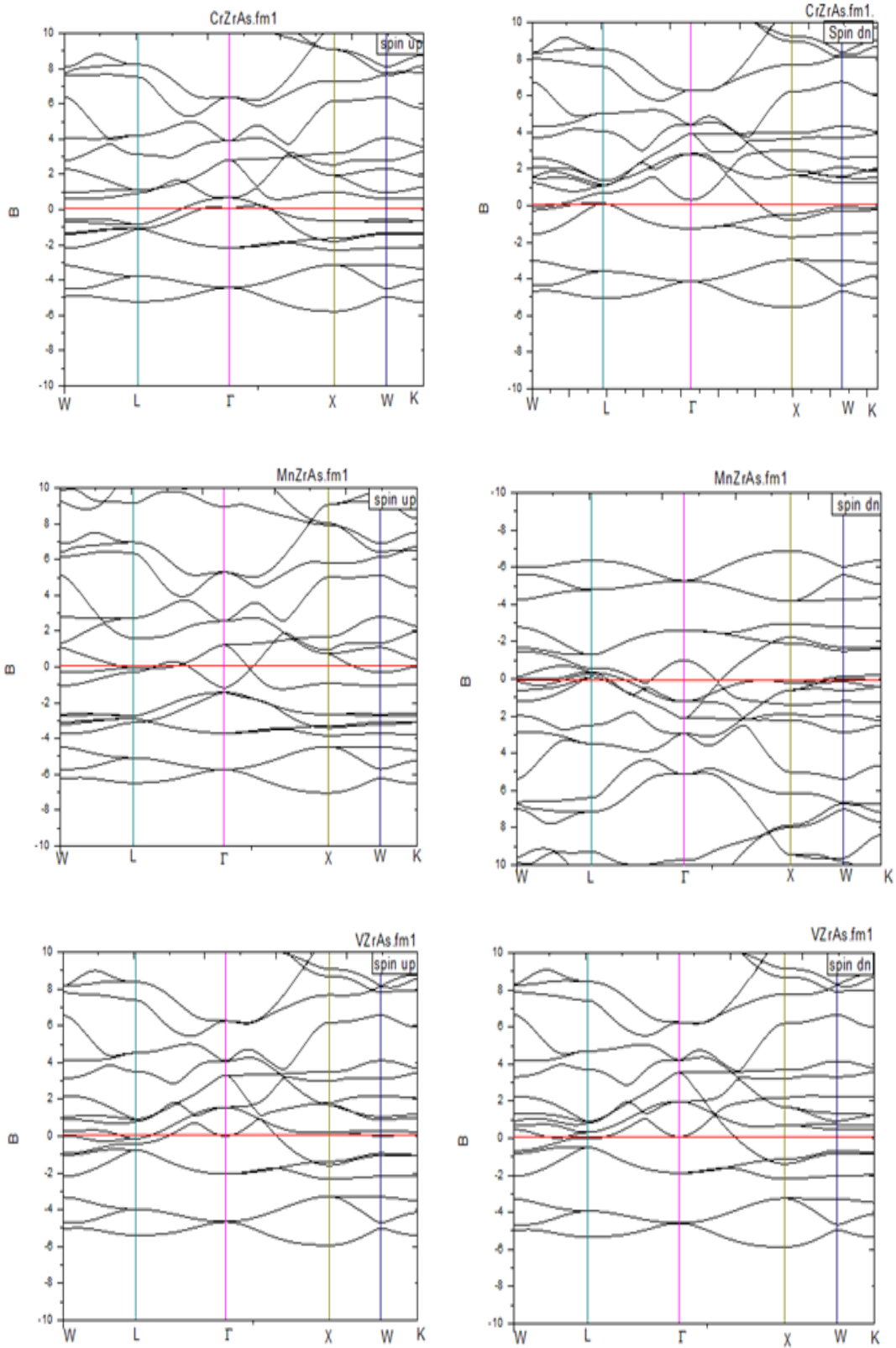
Chapitre II : Résultats et discussions

entre les électrons occupés et les électrons libres. La polarisation de spin de l'électron est également une propriété importante de la structure de bande, qui décrit l'orientation du spin de l'électron dans le matériau.

En résumé, la structure de bande est essentielle pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux, telles que la conductivité, l'interaction électrique et la polarisation de spin. En analysant la structure de bande, il est possible de déterminer la nature des électrons dans un matériau et leur comportement, ce qui est crucial pour le développement de technologies électroniques avancées.[49][50]

Les diagrammes de structure de bande dans les figures II-3 et II-4 ci-dessous contiennent des points spécifiques dans l'espace réciproque du réseau cristallin appelés points exceptionnels, ces points sont Γ , X, W, K et L qui représentent des points spécifiques dans la première zone de Brillouin.

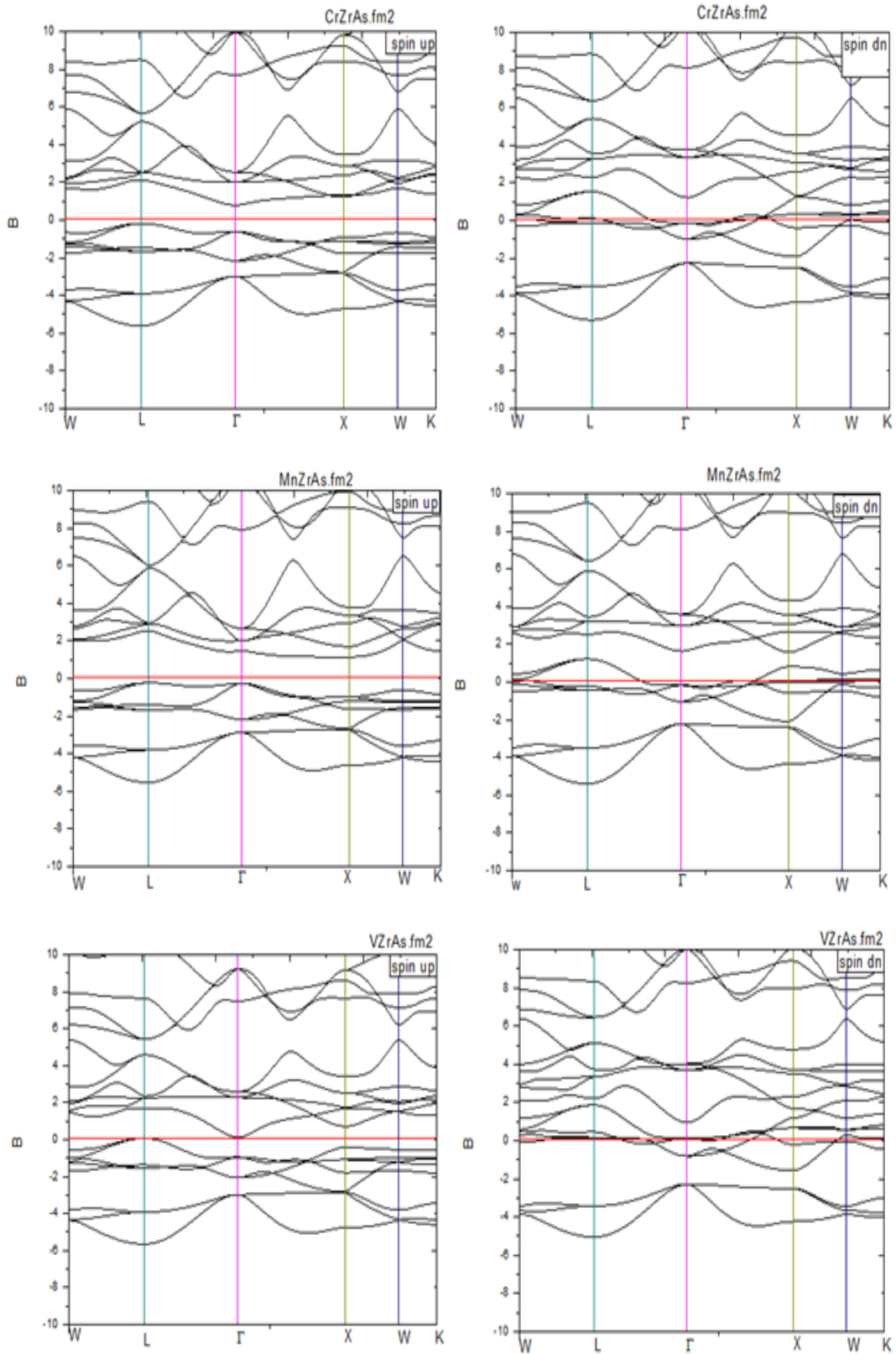
Chapitre II : Résultats et discussions



Chapitre II : Résultats et discussions

Figure II-3 : Structures des bandes de HH XZrAs (X=Cr,Mn,V) du type 1

Chapitre II : Résultats et discussions



Figures II-4 : Structures des bandes de HH XZrAs (X=Cr,Mn,V) du type 2

Chapitre II : Résultats et discussions

L'analyse de la structure de bande a été utilisée pour étudier les propriétés électroniques des alliages de type 1 et de type 2. Les résultats de cette analyse ont montré que les alliages de type 1 ont une nature métallique en raison de l'absence de gap, caractérisée par des propriétés de conductivité électrique élevées, et que les spins up et down dans ces alliages sont conducteurs. En revanche, les résultats ont montré que les alliages de type 2 ont une nature half-métallique en raison de gap convergé dans les deux matériaux CrZrAs et VZrAs par contre le matériau MnZrAs a un gap divergence, avec des propriétés similaires aux semi-conducteurs, où le spin up dans ces alliages est semi-conducteur, tandis que le spin down est conducteur, ce qui lui confère une polarisation de spin efficace.

Il est connu que les électrons interagissent différemment dans les alliages différents, ce qui conduit à des propriétés électroniques différentes. En considérant les résultats mentionnés ci-dessus, on peut dire que les alliages de type 1 ont les mêmes propriétés électroniques des deux côtés, ce qui en fait de bon conducteurs d'électricité. En revanche, les alliages de type 2 présentent des propriétés différentes entre les spins up et down, ce qui conduit à une conductivité électrique plus faible. Cela peut être attribué à l'interaction des électrons à des points spécifiques dans la structure de bande, où l'interaction différente des électrons dans les spins up et down peut conduire à des propriétés électroniques différentes pour les alliages de type 2.

II-4-2 Densité d'états :

Le terme "densité d'état électronique" fait référence au nombre d'états disponibles pour les électrons dans la structure atomique ou cristalline d'un matériau. On peut imaginer la densité d'état électronique comme le nombre d'états individuels qu'un électron donné peut occuper dans le système électronique.

La densité d'état électronique est généralement représentée comme une fonction de l'énergie (E) qui exprime le nombre d'états disponibles pour les électrons à différents niveaux d'énergie. La densité d'état électronique est influencée par la structure cristalline du matériau, la température et d'autres effets électroniques.

Pour les matériaux cristallins, la densité d'état électronique peut être représentée

Chapitre II : Résultats et discussions

par la distribution des états individuels à différents niveaux d'énergie à travers l'espace électronique. Cette distribution dépend des propriétés de la structure cristalline du réseau et des interactions entre les électrons et les atomes.

La densité d'état électronique peut être utilisée pour prédire les propriétés électroniques des matériaux, telles que la capacité électrique, la conductivité électrique et magnétique. La densité d'état électronique est analysée dans les études de masse commune, électronique et physique des matériaux.

En général, on peut dire que la densité d'état électronique joue un rôle crucial dans la détermination des propriétés électroniques des matériaux, et aide à comprendre l'interaction des électrons dans le réseau cristallin et ses effets sur les propriétés physiques.

La densité d'état totale fait référence au nombre d'états disponibles pour les électrons dans tous les niveaux d'énergie possibles dans le matériau. En d'autres termes, il reflète les états électroniques disponibles pour tous les électrons dans le matériau.

En outre, il existe le concept de densité d'état partielle, qui fait référence au nombre d'états disponibles pour les électrons dans les différents niveaux d'énergie d'une partie spécifique du matériau. Il peut être déterminée à l'aide de modèles calculatoires et expérimentaux.

La densité d'état totale et partielle est liée à l'énergie de Fermi qui est le niveau d'énergie le plus élevé des états électroniques qu'un électron peut occuper dans le matériau à une température de zéro absolu. La densité d'état est affectée par l'énergie de Fermi, la densité électronique augmentant dans les niveaux d'énergie inférieurs à mesure que l'énergie de Fermi se rapproche du niveau d'énergie.[\[51\]](#)[\[52\]](#)

Les densités d'états totales (DOS) et les densités d'états partielles (PDOS) des composés XZrAs (X=Cr, Mn, V) pour les type 1 et type 2 sont calculées et tracées dans les figures II-5, II-6 et II-7.

Chapitre II : Résultats et discussions

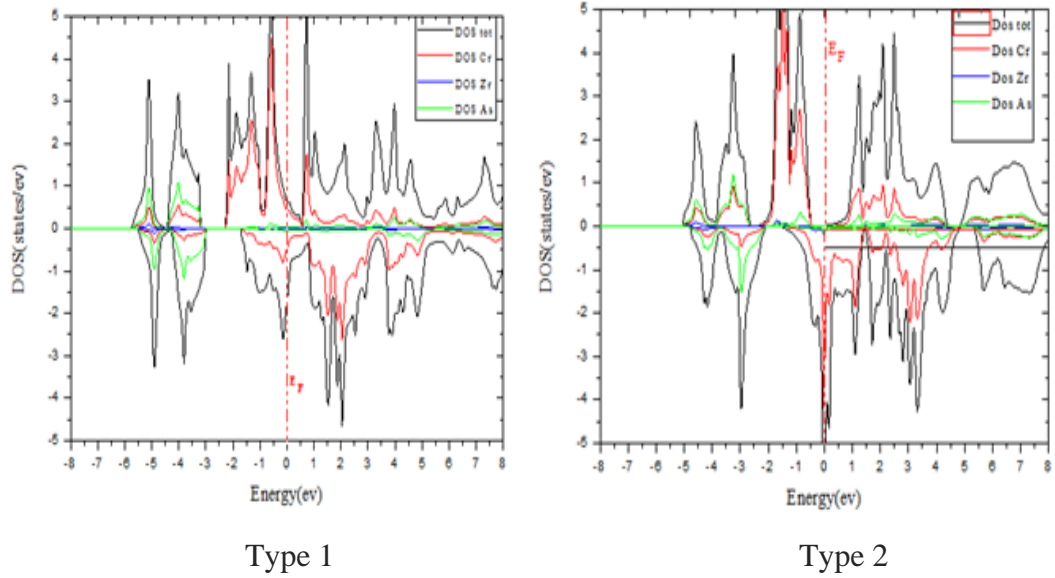


Figure II-5 : La densité d'état totale et partielle de CrZrAs.

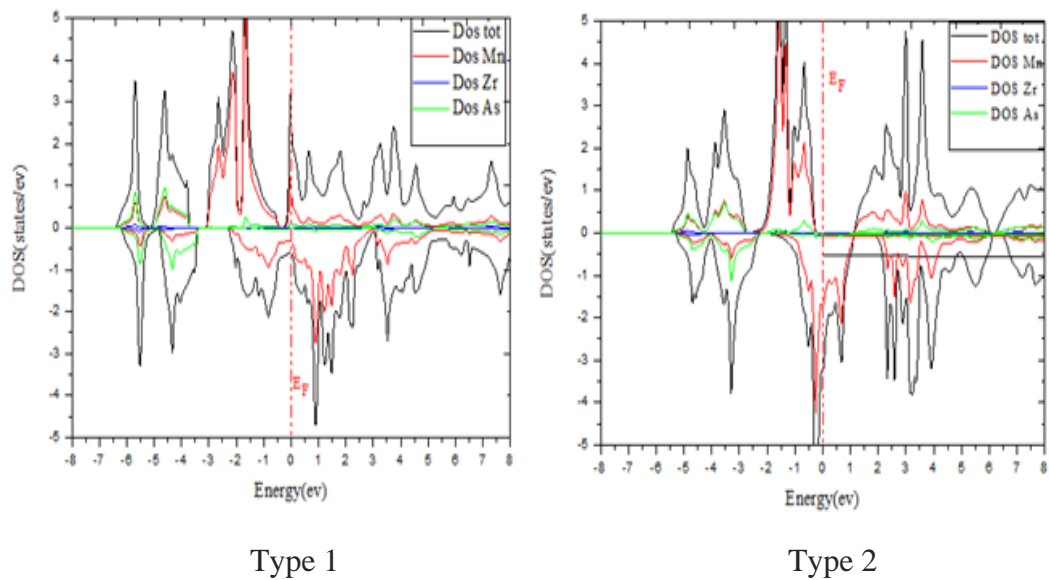


Figure II-6 : La densité d'état totale et partielle de MnZrAs.

Chapitre II : Résultats et discussions

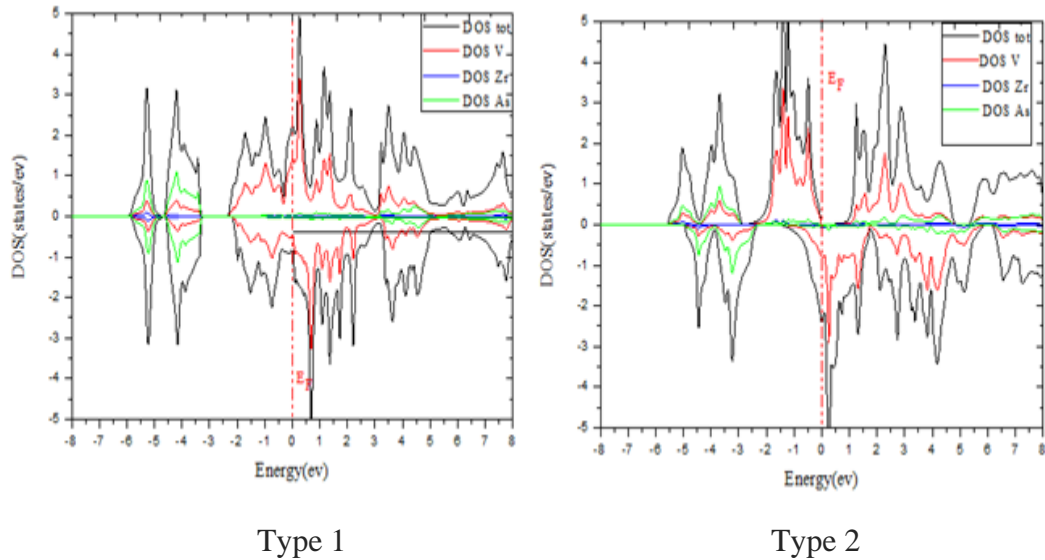


Figure II-7 : La densité d'état totale et partielle de VZrAs.

- ❖ D'après ces figures, il est clair que les densités d'états des électrons majoritaires (spin-up) et minoritaires (spin-down) présentent des intersections métalliques au niveau de Fermi pour les types 1 des composés, ce qui indique un caractère métallique de ces composés.
- ❖ Par contre pour les types 2 les densités d'états des électrons majoritaires (spin-up) présentent des intersections métalliques et les densités d'états des électrons minoritaires (spin-down) présentent des intersections semi-conducteurs au niveau de Fermi ce qui indique un caractère half-métallique de ces composés.
- ❖ On note également que l'élément X est la substance la plus efficace dans le matériau avec des vibrations spécifiques à cet élément qui présentent un moment magnétique élevé par rapport aux autres éléments.

CONCLUSION

GENERALE

Conclusion générale

CONCLUSION GENERALE :

Le but de ce type de recherche résidait à découvrir une nouvelle efficacité matériau adapté au spintronique, appelés half-Heusler (HH). Pour cela, nous avons étudié des quelques propriétés physiques telles que (propriétés structurales, électroniques) des alliages $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) pour 3 types (0; 1/2; 1/4), (1/4; 0; 1/2), (1/2; 1/4; 0).

On a effectué les calculs des différentes propriétés susmentionnées de ces systèmes en utilisant une méthode très efficace, non coûteuse et applicable à plusieurs familles de matériaux dite méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et implémentée dans le code Wien2k, en utilisant les approximations GGA.

L'étude des propriétés structurales a montré que ces matériaux étaient plus stables dans le premier type et l'étude des propriétés électroniques a montré que toutes les HH $XZrAs$ ($X=Cr, Mn, V$) présentent un caractère demi-métallique ferromagnétique avec une polarisation de spin au niveau de Fermi pour les deuxièmes type, et l'effet de l'élément X (Cr, Mn, V) sur l'état magnétique du composé.

Et enfin, mon étude a abouti à des résultats conformes aux conclusions principales des recherches précédentes dans ce domaine, de manière scientifique. [53]

REFERENCES

REFERENCES

REFERENCES :

- [1] Bernard Bonin, Les matériaux au cœur du processus d'innovation, ParisCEA,59, 2010.
- [2]Jonathan Paiano, Découverte d'un nouveau matériau inorganique présentant la plus faible conductivité thermique jamais observée, Shutterstock/University of Liverpool, 2021
- [3] Omar Bajjou, Méthodes de synthèse des nanomatériaux, Faculté de sciences de Fès - Master 0000.
- [4] Jean-Louis Pariente, Franck Villars et Pierre Conort, Les matériaux biologiques, Progrès en Urologie 15(2) 964-970, 2005
- [5] Benouda Hanane, contribution a l'étude des propriétés physiques de l'alliage demi-heusler FeVSn a l'aide d'un calcul ab-initio, Diplôme de Master en Physique, universite Abdelhamid Ibn Badis, 2021.
- [6]Claudia Felser, Atsufumi Hirohata, Heusler alloys, Springer, 2015.
- [7]I. Galanakis, Ph. Mavropoulos, H. Dederichs, Electronic structure and Slater–Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles, Journal of Physics D: Applied Physics 39 (5), 765, 2006.
- [8]C. Timm, AP Schnyder, DF Agterberg, PMR Brydon, Inflated nodes and surface states in superconducting half-Heusler compounds, Physical Review B 96 (9), 094526, 2017.
- [9]Imane Barkat, Etude du premier principe des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et élastiques des composés: CoVTiX (X= As, Si), Université Mohamed Boudiaf, M'sila, 2017.
- [10]KhadraTiaiba, Etude de quelques propriétés physiques des alliages quaternaires d'Heusler, universite Mohamed Boudiaf-M'sila, 2020.
- [11]Abdelkader Merabet, Abdel DjaouadBaazi, Contribution à l'étude des propriétés structurales, mécaniques, électroniques, et magnétiques du matériau Heusler quaternaire CoFeTiAs, Université ST, tissemsilt, 2022
- [12]Aya Seraich, Etude des propriétés physiques de quelque alliages quaternaires d'heusler, universite Mohamed Boudiaf-M'sila, 2021.
- [13]Zhaoqiang Bai Western Digital Corporation Lei Shen Guchang HanYuan Ping Feng, Review of Heusler Compounds, arXiv, 02(04) 2013.
- [14]Yunlong Jin, Novel Half-Metallic and Spin-Gapless Heusler Compounds, University of Nebraska – Lincoln 8-2017.
- [15]Siham Ouardi, Electronic Structure and Physical Properties of Heusler Compounds for Thermoelectric and Spintronic Applications, der Johannes Gutenberg-University, 2012.

REFERENCES

- [16] Zipporah Wanjiku, structural electronic and magnetic properties of X_2YZ heusler compound Mn_2VZ ($Z = Al, In$), Co_2YIn ($Y = V, Nb, Ti$) and XYZ half heusler compounds $CoYIn$ ($Y = V, Nb, Ti$) for spintronic application, university of Nairobi Muthui, 2017.
- [17] Tanja Graf, Claudia Felser, Stuart S. Parkin Simple rules for the understanding of Heusler compounds, *Progress in solid state chemistry*, 39(1) 2011.
- [18] Emily E Levin, Joshua D Bocarsly, Kira E Wyckoff, Tresa M Pollock, Ram Seshadri, Tuning the magnetocaloric response in half-Heusler/Heusler $MnNi_{1+x}Sb$ solid solutions, *Physical Review Materials* 1 (7), 075003, 2017.
- [19] Takayuki Kojima Satoshi Kameoka an-Pang Tsai, Heusler Alloys: A Group of Novel Catalysts *ACS Omega*, 2, 1, 147–153, 2017.
- [20] S. Skaftouros, Kemal Özdoğan, E Şaşıoğlu, I Galanakis, Search for spin gapless semiconductors: The case of inverse Heusler compounds, *Applied physics letters* 102 (2), 022402, 2013.
- [21] Ondřej Životský, Kateřina Skotnicová, Tomáš Čegan, Jan Juřica, Lucie Gembalová, František Zažímal, Ivo Szurman, Structural and Magnetic Properties of Inverse-Heusler Mn_2FeSi Alloy Powder, *Ball Milling Materials*, 15(3), 697, 2022.
- [22] Jason K. Kawasaki, Shouvik Chatterjee, Paul C. Canfield & Guest Editors, Full and half-Heusler compounds, *MRS Bulletin* 47 (2022).
- [23] J. A. Logan, S. J. Patel, S. D. Harrington, C. M. Polley, B. D. Schultz, T. Balasubramanian, A. Janotti, A. Mikkelsen & C. J. Palmstrøm, Observation of a topologically non-trivial surface state in half-Heusler $PtLuSb$ (001) thin films, *Nature Communications* 7, 11993 (2016).
- [24] Kamil Ciesielski, Karol Synoradzki, Damian Szymański, Kazuki Tobita, Katarzyna Berent, Patryk Obstarczyk, Kaoru Kimura & Dariusz Kaczorowski, Half-Heusler phase $TmNiSb$ under pressure: intrinsic phase separation, thermoelectric performance and structural transition, *Scientific Reports* 13, 1592 (2023).
- [25] Feng Yan, Xiuwen Zhang, Yonggang G. Yu, Liping Yu, Arpun Nagaraja, Thomas O. Mason & Alex Zunger, Design and discovery of a novel half-Heusler transparent hole conductor made of all-metallic heavy elements, *Nature Communications* 6, 7308 (2015).
- [26] Jianhua Ma, Vinay I. Hegde, Kamaram Munira, Yunkun Xie, Sahar Keshavarz, David T. Mildebrath, C. Wolverton, Avik W. Ghosh, and W. H. Butler, Computational Investigation of Half-Heusler Compounds for Spintronics Applications, USA, CHORUS, 2016.
- [27] Lakhan Bainsla, KG Suresh, Equiatomic quaternary Heusler alloys: A material perspective for spintronic applications *Applied, Physics Reviews* 3 (3), 031101, 2016.

REFERENCES

- [28] Khaoula Benmoussa, Zineb Boutaleb, M Dehbaoui, Investigation du comportement électrique et magnétique d'un matériau Heusler quaternaire CoFeCrZ (Z= Al, Ga), université Medea, 2020.
- [29] Belbachir Souheil, Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés Heusler quaternaires, université d'Oran Mohamed Boudiaf, 91, 2020.
- [30] Abbassa Hamza, contribution a l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'heusler, L'Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem Thèse de Doctorat Es-Sciences, 170, 2015.
- [31] Larbi Khadidja, Effet du métal de transition sur les propriétés électroniques des composés Full Heusler Co₂YA₁ (Y=Cr, Mn, Cu), université Abdelhamid Ibn Badis-Mostaganem diplôme de Master en Physique, 36 (4) 2016.
- [32] M Eschrig, J Kopu, JC Cuevas, Gerd Schön, Theory of half-metal/superconductor heterostructures, Physical review letters 90 (13), 137003, 2003.
- [33] J-H Park, E Vescovo, H-J Kim, C Kwon, R Ramesh, T Venkatesan, Direct evidence for a half-metallic ferromagnet, Nature 392 (6678), 794-796, 1998.
- [34] S. Semboshi, R. Y. Umetsu, Y. Kawahito & H. Akai, A new type of half-metallic fully compensated ferrimagnet, Scientific Reports, DOI: 10.1038/s41598-022-14561-8.
- [35] Tsutomu Mashimo, Xinsheng Huang, Xu Fan, Keiichi Koyama, Mitsuhiro Motokawa, Slater-Pauling curve of Fe-Cu solid solution alloys, Physical Review B 66 (13), 132407, 2002.
- [36] Abdallah Oumsalem, Bourezig Yamina, Zakia Nabi, B. Bouabdallah, Ab initio study of the structural, electronic, and magnetic properties of Co₂FeGa and Co₂FeSi and their future contribution to the building of quantum devices, Turkish Journal of Electrical Engineering and Computer Sciences 26(3):1249-1260, 2018.
- [37] S Skaftouros, Kemal Özdoğan, E Şaşıoğlu, I Galanakis, Generalized Slater-Pauling rule for the inverse Heusler compounds, Physical Review B 87 (2), 024420, 2013.
- [38] Albert Fert, Les débuts de la spintronique-Travaux précurseurs et magnéto-résistance géante, Reflets de la Physique, 5-10, 2009.
- [39] J. Perrodeau, Qu'est-ce que la spintronique et quels enjeux ? Les défis du CEA, 2022.
- [40] Mr Rajesh Jha, Upcoming Future of Electronics, 2023.
- [41] Raymond El Hajj, Etude mathématique et numérique de modèles de transport: application à la spintronique, Université Paul Sabatier-Toulouse III, 2008.
- [42] Sophie Cazottes, Microstructure à fine échelle d'alliages à propriétés de magnéto-résistance géante: relation avec les propriétés magnétiques. Cas de rubans de Cu₈₀Fe_xNi_{20-x} (x= 5, 10, 15 at%) Université de Rouen, 2008.

REFERENCES

- [43] Soumia Lardjane, Study of structural, electronic and magnetic properties of the diluted magnetic semiconductor: Co-doped ZnO, research gate, 2013.
- [44] Jo De Boeck Enlong Liu, Materials and designs of magnetic tunnel junctions with perpendicular magnetic anisotropy for high-density memory applications, PhD of Electrical Engineering Advisor, 2018.
- [45] William H Butler, Tunneling magnetoresistance from a symmetryfiltering effect, Science and Technology of Advanced Materials, PMC, 9(1) 2008.
- [46] IL Prejbeanu, M Kerekes, Ricardo C Sousa, H Sibuet, Olivier Redon, Bernard Dieny, JP Nozières, Thermally assisted MRAM, Journal of Physics: Condensed Matter 19 (16), 165218, 2007.
- [47] Vijay Laxmi Kalyani, Vaishali Agrawal, Spintronics-A Vision for Future in Electronics and Computers, JMEIT, India, 2(2), 2015.
- [48] Mlle. Bentaifour Djaouher, Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire NiCoMnGexSn $1-x$, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem diplôme de Master, 2017
- [49] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, university of California, Berkeley, 2005
- [50] Jean-Jacques Pireaux, Roland Caudano, S Svensson, E Basilier, P-A Malmqvist, U Gelius, K Siegbahn, Étude de la structure électronique des hydrocarbures linéaires saturés en fonction de leur taille.-I. Evolution d'un niveau électronique vers une structure de bande, Journal de Physique 38 (10), 1213-1220, 1977
- [51] N. Pottier et D. Calecki, densité d'état électronique et fluctuations locales de concentration dans les alliages binaires désordonnés, journal de physique, 35(5), 1974, Université Paris, VII, 2, place Jussieu, 75005 Paris, France.
- [52] Shlomo Alexander, Raymond Orbach, Density of states on fractals: «fractons» Journal de Physique Lettres 43 (17), 625-631.
- [53] H Mokhtari, L Boumia, M Mokhtari, F Dahmane, D Mansour, R Khenata, Mechanical stability, electronic and magnetic properties of XZrAs (X= Cr, Mn, V) half Heusler compounds, 2023