

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : physique des rayonnements

Par

M^{elle}. Merabet Ikram

Sur le thème

**Prédiction des propriétés physiques de l'alliage CoVTe
Par la méthode FP-LAPW**

Soutenu le : 30/06/2019 devant le jury composé de :

Dr. Meskine Mohamed	MCA	Université Dr. Tahar Moulay, Saida	Président
Dr. Djaafri Tayeb	MCA	Université Dr. Tahar Moulay, Saida	Encadreur
Dr. Djaafri Abdelkader	MCB	Université Dr. Tahar Moulay, Saida	Co-encadreur
Dr. Saadaoui Fatiha	MAB	Université Dr. Tahar Moulay, Saida	Examineur

Année Universitaire 2018 - 2019

Dédicaces

Au nom d'Allah, le clément le miséricordieux.

Je dédie du fond de mon cœur ce modeste travail :

Aux personnes les plus chères du monde, ma mère et mon père qui sont la lumière de ma réussite.

A mon frère Abd El kader.

A mes sœurs Fatima, Djamila, sawsen.

A mon cher neveu Abd EL Baki Adam

A toute ma famille Merabet.

A mes sœurs en dieu : A.Hanane, H.Imane, H.Mita, T.Hafida , H.kawtar

A tous mes amies B.Fadila, M.Zohra, B.Latifa ; B.Khaoula, M. AichaM. Hadj,

S.Saleh, S.Abd El Hak

A tous mes enseignants.

A toute la promotion physique de rayonnement 2018 et tous mes collègues sans exception.

A Tous ceux que je connais et qui me connaissent et tous ceux que j'aime et qui m'aiment.

Ikram

Remerciement

Je tiens à remercier en premier lieu dieu le tout puissant de m'avoir donner
courage et santé pour achever ce travail.

Je voulais tout d'abord exprimer mon profonde reconnaissance à Monsieur «
Dr.Djaafri T et Dr. Djaafri AEK» mon encadreur et mon Co-encadreur
exemplaires, qui ont dirigé mon travail ; leurs conseils et leurs commentaires
précieux m'ont aidé à surmonter mes difficultés et de progresser dans ma
mémoire de fin d'étude.

Aussi à remercier les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail.

Aussi mes remerciements s'adressent à l'ensemble des enseignants du
département de physique de l'université Dr. Moulay Tahar de Saida et surtout
mes enseignants durant mon cursus universitaire.

Pour terminer, je remercie toutes les personnes qui ont participées, de près ou
de loin, à la réalisation de ce travail ; un grand merci à tous.

ملخص

ان العمل المعروض في المذكرة قد تم باستعمال نظرية الكثافة الوظيفية DFT. أجريت الحسابات على أساس مقارنة الكمون التام للموجات الخطية المتزايدة (FP-LAPW) بتقريب معمم التدرج (GGA) في إطار نظرية باري، بارك و ارنزرهف (PBE) باعتبارها بالأخص علاقة تبادل وظيفية أكثر من كونها جزء من حساب الطاقة الكلية. قد تمت دراسة الخواص البنيوية، الالكترونية المغناطيسية للمركب النصف-هاسلر CoVTe من خلال التحليل البنيوي للأشرطة الطاقوية و كثافة المستويات المحسوبة من اجل المركب لوحظ تهجين قوي بين الحالات (د) للذرات ذات التكافؤ العالي (Co) و الحالات (د) للذرات ذات التكافؤ المنخفض (V) للمعادن الانتقالية TM. من خلال دراسة كثافة المستويات العامة و الجزئية (DOS) و العزم المغناطيسي تبين أن هذا المركب هو نصف-معدن ممغنط مستقر. كما أن تأثير حجم الخلية الأساسية على الخواص نصف-معدنية و المغناطيسية كبير. انه لمن المهم الإشارة إلى أن نتائجنا في ما يخص العزم المغناطيسي الكلي للمركب CoVTe يساوي $2 \mu_B$ تخضع للقاعدة $Z_T - 18 \mu_{tot}$. ان دراسة الخواص الميكانيكية بينت ان المركب مستقر لين و ان الروابط المعدنية هي المسيطرة. و اخيرا تمت دراسة الخواص الترموديناميكية مثل السعات Cv و Cp، درجة حرارة دوباي، معامل غرنشن، معامل الانضغاط و معامل التمدد الحراري لأول مرة.

Résumé

Le travail de ce mémoire est basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT réalisés via FP-LAPW computationnelle approches dans le cadre de l'approximation des gradients généralisée GGA paramétrée par Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) et implémenté comme une corrélation et échange fonctionnelle autant qu'une partie de calcul de l'énergie total. L'objectif était l'étude des caractéristiques structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques de l'alliage half-Heusler CoVTe. L'investigation de la structure des bandes d'énergies et des densités d'états montre une forte hybridation entre les états d des atomes des métaux de transition de forte valence (Co) et les états d des atomes du métal de transition de faible valence (V), ce qui engendre un gap half-métallique. L'étude des densités d'états totales et partielles (DOS) et les résultats des moments magnétiques de spin révèlent que ce composé est à la fois stable et half-métallique ferromagnétique idéal. Les effets du volume de la maille élémentaire sur les propriétés half-métalliques et magnétiques sont importants. Il est intéressant de noter que nos résultats du moment magnétique total pour l'alliage CoVTe égale à $2 \mu_B$ par maille élémentaire, obéit à la règle $\mu_{\text{tot}} = Z_t - 18$. La prédiction des propriétés mécanique révèle que le composé est mécaniquement stable, dure et ductile et que les liaisons métalliques dominant. Finalement, les propriétés thermiques tel que les capacités spécifiques C_v et C_p , la température de Debye, le paramètre de Grüneisen, le module d'incompressibilité, le coefficient de dilatation thermique sont étudiées pour la première fois on utilisant le modèle de Debye.

Abstract

Our work is based on the First-principles spin polarized density functional theory (DFT). The calculations are accomplished within the state of the art full-potential (FP) linearized (L) augmented plane wave (APW) computational approach framed within DFT. Generalized gradient approximation (GGA) parameterized by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) is implemented as an exchange correlation functional as a part of total energy calculation. The aim of our study is to predict the structural, electronic, magnetic and thermodynamics characteristics of the half-Heusler, CoVTe compound. From the analysis: calculated electronic band structure as well as density of states for both compounds, a strong hybridization between d states of the higher valent transition metal (TM) atoms (Co) and lower valent TM atoms of (V) is observed. Furthermore total and partial density of states (DOS) of ground state and the results of spin magnetic moments reveal that this compound is both stable and ideal half-metallic ferromagnetic. The effects of the unit cell volume on magnetic properties and half-metallicity are crucial. It is worth noting that our calculated result of total spin magnetic moment, for CoVTe equal to $2\mu_B$ per unit cell, nicely follow the rule $\mu_{\text{tot}} = Z_t - 18$. The investigation of the mechanical properties reveals that the compound is mechanically stable, hard and ductile and that metallic bonds dominate. Finally, the thermodynamic properties such as the specific capacities C_v and C_p , the Debye temperature, the Grüneisen parameter, the bulk modulus, the coefficient of thermal expansion are studied for the first time using the Debye model.

Tableau des matières

Introduction générale.....	01
----------------------------	----

chapitre I:«Théorie de la fonctionnelle de la densité « DFT»

I.1 Introduction.....	04
I.2. L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin.....	05
I.3. L'approximation de Born Oppenheimer.....	06
I.4. L'approximation de Hartree-Fock.....	07
I.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité.....	08
I .5.1. Introduction.....	08
I.5.2. Théorème de Hohenberg et Kohn.....	09
I.5.3. Equations de Kohn-Sham.....	10
I.5.4. Traitement de l'échange et de la corrélation	14
I.5.5. explication de l'approche de Hohenberg et Kohn	15
I.5.6. Approximation locale (LDA).....	16
I.5.7. L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	17
Références bibliographiques	20

Chapitre II « spintronique »

I.1. Introduction.....	22
II.2. L'électronique de spin.....	23
II.2.1. Magnétorésistance géante (GMR).....	23
II.2.2. Magnétorésistance tunnel (TMR).....	25
II.3. Transfert de spin.....	28
II.4 L'injection de spin et les composants.....	30
II.6.Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM).....	31
II.7.L'intégration de semi-conducteurs dans la spintronique.....	33
Références bibliographiques.....	36

Chapitre III «Prédiction des propriétés Physiques de l'alliage CoVTe».

<i>III.1. Introduction.....</i>	<i>40</i>
<i>III.2. L'électronique de spin (spintronique).....</i>	<i>41</i>
<i>III.3. Définition d'un matériau half-métallique</i>	<i>42</i>
<i>III.4. Description des éléments du composé CoVTe.....</i>	<i>43</i>
<i>III.4.1. Le Cobalt.....</i>	<i>43</i>
<i>III.4.2. Le vanadium</i>	<i>44</i>
<i>III.4.3. Le tellure.....</i>	<i>45</i>
<i>III.5. Structure du composé CoVTe</i>	<i>46</i>
<i>III.6. Les détails de calcul</i>	<i>49</i>
<i>III.7. Résultats et discussion</i>	<i>49</i>
<i>III.7.1. Les propriétés électroniques et magnétiques</i>	<i>49</i>
<i>III.7.2. L'origine du caractère half-métallique</i>	<i>51</i>
<i>III.7.3. Les propriétés mécaniques.....</i>	<i>55</i>
<i>III.7.4. Propriétés thermodynamiques.....</i>	<i>58</i>
<i>III.8. Conclusion</i>	<i>62</i>
<i>III.9. Perspective</i>	<i>63</i>
<i>Références bibliographiques.....</i>	<i>64</i>

Liste des Tableaux

Tableau 1 : Les valeurs calculées du paramètre de maille a_0 , volume V_0 , l'énergie E_0 et la différence d'énergie entre l'état ferromagnétique et l'état paramagnétique ΔE	50
Tableau 2 : Le moment magnétique total (μ_{tot}), le moment magnétique local de chaque élément et le moment magnétique dans la région interstitielle (μ_{int}).....	51
Tableau 3 : les valeurs estimées des constantes élastiques C_{ij} (GPa), B (GPa), G (GPa), B/G , A , E et ν	56
Tableau 4 : les valeurs estimées des paramètres élastiques B/G , A , E et ν	56

Liste des figures

FIG.I.1 : (1) système réel constitué de plusieurs électrons en interaction mutuelle, (2) système fictif de même énergie et de même densité électronique que le système réel	10
FIG.I.2: Processus auto-cohérent de Kohn et Sham	13
FIG.II.1 : Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle	24
FIG.II.2 : Illustration d'une jonction tunnel magnétique. Les électrodes sont séparées par une barrière isolante. L'électrode dont l'aimantation est fixe est appelée couche piégée, dure ou de référence tandis que l'autre électrode est appelée couche libre, douce ou de stockage	25
FIG.II.3 : Schéma de la dépendance de la conductance en fonction de l'orientation relative des électrodes magnétiques	27
FIG.II.4 : architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonctions tunnels magnétiques	32
FIG.II.5 : Représentation schématique du Spin FET	34
FIG. III. 1. Représentation de l'élément Co	44
FIG.III. 2 : Représentation de l'élément V	45
FIG.III.3 : Représentation de l'élément Te	46
FIG.III. 4 : La structures Cl_b adaptées par les alliages half-Heusler $CoVTe$	47
FIG.III. 5 : la variation de l'énergie en fonction du paramètre $R_{MT}K_{max}$	47
FIG.III. 6 : la variation de l'énergie en fonction du nombre de points	48
FIG. III.7 : l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire pour les états paramagnétique (PM) et ferromagnétique (FM) du composé $CoVTe$	50
FIG. III .8 : La structure de bande électronique pour les électrons de spin majoritaires dans $CoVTe$	52

FIG. III.09 : <i>La structure de bande électronique pour les électrons de spin minoritaires dans CoVTe</i>	53
FIG. III.10 : <i>les densités d'états DOS partiel et total calculée pour le composé CoVTe</i>	53
FIG. III.11 : <i>La variation des moments magnétiques en fonction du paramètre de maille dans l'intervalle [-2%, +4%]</i>	54
FIG. III.12 : <i>La structure de bande électronique pour les électrons de spin minoritaires du composé CoVTe pour une dilatation de 4 % et une compression de 2 %</i>	55
FIG. III.13 : <i>les variations de C_V en fonction de la température pour différente valeurs de pressions</i>	59
FIG. III.14 : <i>les variations de CP en fonction de la température pour différente valeurs de pressions</i>	60
FIG. III.15 : <i>Variations de la température de Debye θ en fonction de la température pour différentes pressions</i>	60
FIG. III. 16 : <i>Variations du paramètre de Grüneisen en fonction de la température pour différentes pressions</i>	61
FIG. III. 17. <i>Variations du module d'incompressibilité en fonction de la température pour différentes pressions</i>	61
FIG. III. 18 : <i>Variations du coefficient de dilatation thermique en fonction de la température pour différentes pressions</i>	62

Liste des abréviations

***LDA** : Approximation locale*

***GGA** : L'approximation du gradient généralisé*

***DFT** : Théorie de la fonctionnelle de la densité*

***GMR** : Magnétorésistance géante*

***TMR** : Magnétorésistance tunnel*

***MRAM** : Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires*

***DOS** : Densités d'états*

***FL-APW** : Ondes planes augmentées linéarisées a potentiel complet*

***FM** : Ferromagnétique*

***$\mathcal{M}_{tot}$** : Moment magnétique total*

Introduction général

Introduction général :

La physique de la matière condensée et la science des matériaux jouent un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne fera que progresser dans beaucoup de domaines.

Avant d'employer les matériaux (solides) dans l'industrie, il faut s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques, mécaniques thermodynamiques et optiques.

Les propriétés physiques d'un solide sont étroitement liées au comportement des électrons qui le constituent. Le principal but de la théorie de la matière condensée est de résoudre le problème de la structure électronique des solides. La théorie de la structure électronique est utile à la fois pour comprendre et interpréter les résultats expérimentaux, et pour servir comme moyen de prédiction.

Pour une compréhension fondamentale de la structure électronique et par conséquent des propriétés des matériaux, les théoriciens ont développé des méthodes basées sur des modèles semi-empiriques. De tels modèles comportent souvent de nombreux paramètres ajustables aux données expérimentales. D'autres méthodes de calcul plus rigoureuses et plus sophistiquées dites *ab-initio*, basées sur la théorie quantique fondamentale, utilisent seulement les constantes atomiques comme paramètres d'entrées pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces méthodes sont devenues aujourd'hui un outil de base pour l'étude des propriétés structurales, électroniques, mécaniques et optiques des molécules et des matériaux. Elles sont aussi un outil de choix pour l'étude de certains effets difficiles ou impossibles à déterminer par voie

expérimentale et pour la prédiction de nouveaux matériaux, et elles ont parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire.

La puissance des calculs ab-initio a pour origine le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et ses deux approximations de l'énergie d'échange et de corrélation : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

Le formalisme de base de la DFT est basé sur le théorème de Hohenberg et Kohn (1964) qui repose sur la considération que l'énergie totale d'un système est une fonctionnelle de la densité électronique.

Parmi les méthodes ab-initio, la méthode FP-(L)APW est l'une des plus précises, actuellement pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

La spintronique est considérée comme une des technologies prometteuses permettant, entre autres, de poursuivre la miniaturisation des transistors et d'augmenter leurs performances. Il s'agit d'utiliser le spin de l'électron, alors que l'électronique s'intéresse uniquement à sa charge.

Les deux effets principaux de la spintronique étudiés jusqu'à présent sont la magnétorésistance géante (GMR) et la magnétorésistance tunnel (TMR). L'impact de cette nouvelle branche est déjà considérable, dans la mesure où toutes les têtes de lecture des disques durs actuels sont à base de TMR. Cet effet est également exploité dans des Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM).

L'intégration des semi-conducteurs dans la spintronique donne plusieurs intérêts, un seul composant pourrait combiner la détection de l'information, son traitement et sa

transmission. La première proposition de l'intégration de semi-conducteurs dans la spintronique est la réalisation d'un transistor de spin à effet de champ (SpinFET : Spin Field Effect Transistor).

Cependant, l'injection électrique dans des semi-conducteurs à partir de métaux de transition s'est heurtée à des limitations liées à la différence de conductivité entre le métal ferromagnétique et le semi-conducteur. Semi-conducteur semi-métallique (DMS) sont développés pour la spintronique et pour réaliser des composants comme par exemple le spin-FET (transistor à effet de champ de spin).

Cette étude a pour but la détermination par la méthode FP-LAPW des propriétés structurales magnétiques électroniques thermodynamiques et mécaniques du composé half Heusler CoVTe et prédire son rendement dans la technologie spintronique.

Le travail que nous présentons dans ce mémoire comprend trois chapitres :

Le premier chapitre présente un petit historique concernant les méthodes de calculs, ses différents modèles pour résoudre l'équation de Schrödinger, les approches *ab initio* constituant le fondement de la théorie de la fonctionnelle de densité DFT, ainsi ses principes de base comme la fonctionnelle d'échange corrélation d'énergie. Ce dernier conditionne d'une manière cruciale la qualité des résultats obtenus.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation de l'historique et du concept fondamentaux de la spintronique ainsi que du concept de matériaux dits demi-métaux ferromagnétiques.

Le troisième chapitre consacré à l'étude des propriétés électroniques, magnétiques, mécaniques et thermodynamiques du composé CoVTe par la méthode FP-LAPW en utilisant le code Wien2k.

Chapitre I :
Théorie de la fonctionnelle de
la densité (DFT)

I.1. Introduction :

Les propriétés physiques d'un système solide, illustrées par l'image d'électrons légers en mouvement autour de noyaux lourds, dépendent du comportement de sa structure électronique. La mécanique quantique fournit le cadre idéal à cette étude. Une description complète d'un système quantique à N électrons nécessite le calcul de la fonction d'onde correspondante : $\Psi(r_1, r_2, r_3 \dots, r_N)$ (Le spin est omis ici pour raison de simplicité). En principe ceci peut être obtenu à partir de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, $H\Psi = E\Psi$. Cette équation ne possède des solutions analytiques que dans le cas de l'atome d'Hydrogène. En pratique, pour un solide de plusieurs atomes, le potentiel subi par chaque électron et imposé par le mouvement, non seulement des plus proches voisins mais également par l'ensemble des autres électrons du système réel. Ceci nécessiterait la solution d'une équation de Schrödinger avec un nombre considérable d'équations différentielles simultanées. En général, il n'est pas possible à résoudre cette équation recours à des approximations s'impose. Dans la suite de notre travail nous allons exposer des différentes approches conduisant à la formulation et la mise en œuvre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). La DFT est une reformulation du problème quantique à N corps en un problème portant uniquement sur la densité électronique. Aujourd'hui, la DFT constitue l'une des méthodes les plus utilisées pour les calculs quantiques de structure électroniques du solide. La réduction du problème de qu'elle apporte permet de rendre accessible au calcul l'état fondamental d'un système comportent un important nombre d'électrons [1].

I.2. L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin :

L'équation de Schrödinger est l'équation de base de la physique théorique des solides. Elle permet de trouver les énergies et les fonctions d'ondes associées aux régimes stationnaires d'un système donné. Pour un système composé N_e électrons de coordonnées $\vec{r}_i$ et de masse m_e et charge e , et N_N noyaux de coordonnées $\vec{R}_N$ et de nombre atomique Z_N et de masse m_N , l'équation de Schrödinger s'écrit [2] (pour des effets relativistes, nous devons employer l'équation du Dirac) :

$$(H - E)\Psi = (T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} - E)\Psi = 0 \quad \text{..... (I. 1)}$$

Où $T_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2$; est l'énergie cinétique des électrons

$T_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{N=1}^{N_N} \frac{\nabla_N^2}{m_N}$; est l'énergie cinétique des noyaux

$V_{nn} = \sum_{N=1}^{N_N} \sum_{N' < N} \frac{Z_N Z_{N'} e^2}{|\vec{R}_N - \vec{R}_{N'}|}$; est l'énergie potentielle de l'interaction entre les noyaux

$V_{ee} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j < i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$; est l'énergie potentielle de l'interaction entre les électrons

$V_{en} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{N=1}^{N_N} \frac{Z_N e^2}{|\vec{R}_N - \vec{r}_i|}$; est l'énergie potentielle de l'interaction (électrons – noyaux)

Pour connaître l'énergie et la fonction d'onde du système il faut résoudre cette équation à plusieurs variables, ce problème est connu en physique théorique sous le nom problème à plusieurs corps, et c'est pratiquement impossible même pour les systèmes d'un nombre de particules peu élevé.

I.3. L'approximation de Born Oppenheimer :

Le noyau est constitué des protons et de neutrons (la masse de proton est proche à celle de neutron), la masse du proton est 1836 supérieure à celle de l'électron. Par conséquent, on peut négliger en 1ère approximation l'énergie cinétique des noyaux devant celle des électrons, c'est 1 approximation dite adiabatique de Born Oppenheimer, on peut écrire la fonction d'onde dans ce cas comme [2] :

$$(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_N\}) = \Phi_{\vec{R}_N}(\{\vec{r}_i\}, X\{\vec{R}_N\}) \dots \dots \dots (I. 2)$$

Où $\Psi_n(\{\vec{r}_i\})$ et $X(\{\vec{R}_N\})$ sont respectivement la fonction d'onde électronique et la fonction d'onde des noyaux figés. Si on remplace l'équation (I.2) dans (I.1) on peut montrer que :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \Delta_i \right) + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j < i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{N=1}^{N_N} \sum_{N' < N} \frac{Z_N Z_{N'} e^2}{|\vec{R}_N - \vec{R}_{N'}|} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{N=1}^{N_N} \frac{Z_e e^2}{|\vec{R}_N - \vec{r}_i|} \right\} \Phi_{\vec{R}_N}(\{\vec{r}_i\}) = E_{el}(\{\vec{R}_N\}) \Phi_{\vec{R}_N}(\{\vec{r}_i\}) \dots \dots \dots (I. 3)$$

La fonction $\Phi_{\vec{R}_N}(\{\vec{r}_i\})$ est une fonction propre de l'hamiltonien avec la valeur propre $E_{el}(\{\vec{R}_N\})$ pour les positions (R_N) des noyaux figés. Born et Oppenheimer ont montré que le mouvement des noyaux est régi par l'équation suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{N=1}^{N_N} \frac{\Delta_N}{m_N} E_{el}(\vec{R}_N) X(\{\vec{R}_N\}) = E_{nucl}(\{\vec{R}_N\}) \right] \dots \dots \dots (I. 4)$$

Où $E_{el}(\{\vec{R}_N\})$ est l'énergie électronique évaluée par l'équation (I.3) et E_{nucl} , est l'énergie des noyaux. Cependant, numériquement, pour décrire la fonction d'onde nous avons besoin des points de l'ordre de M^N (où M est le nombre de décompositions de l'espace, et N est le nombre d'électron). Ainsi la description directe pour une telle

fonction d'onde est pratiquement impossible, excepté par quelques méthodes statiques (méthodes de Monte Carlo quantique).

I.4. L'approximation de Hartree-Fock :

L'approximation de Born-Oppenheimer montre que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire l'équation stationnaire de Schrödinger [3] :

$$H_e \Psi_e = E_e \Psi_e \dots \dots \dots (I. 5)$$

En remplaçant l'hamiltonien H_e par son expression, la relation (I.5) devient :

$$\left[\sum_i \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i,\alpha} U_{i\alpha} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \dots \dots \dots (I. 6)$$

Cette dernière équation peut être résolue pour une seule particule. Les interactions n'existantes pas entre les électrons ($U_{ij} = 0$), on peut décomposer, dans ces conditions, l'équation (I.6) en un système de plusieurs équations. Cependant, il faut trouver un moyen mathématique qui permette de tenir compte des interactions électroniques tout en conservant le système d'électrons indépendant. Dans ce but, Hartree a introduit un champ extérieur dont lequel chaque électron peut se mouvoir indépendamment des autres. Ainsi, l'hamiltonien peut être mis sous la forme suivante :

$$H_e = \sum_{i=1}^n H_i \dots \dots \dots (I. 7)$$

Où l'hamiltonien correspondant à l'électron (i) vaut :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + V(r_i) + \Omega_i(r_i) \dots \dots \dots (I.8)$$

$\Omega_i(r_i)$ Représente l'énergie potentielle d'un électron (i) soumis à l'action du champ moyen produit par tous les autres électrons et $V(r_i)$ représente l'énergie potentielle de cet électron dans le champ moyen produit par tous les noyaux du cristal. Puisque l'hamiltonien ne renferme plus de termes représentant les énergies d'interactions des électrons, la forme de la fonction d'onde totale est le produit de fonctions d'onde de chacun des électrons.

Par conséquent, l'énergie est la somme des énergies de tous les électrons [4,5] :

$$\Psi_e(r_1, r_2, r_3 \dots r_N) = \prod_i^n \psi_i(r_i) \dots \dots \dots (I. 9)$$

$$E_e = \sum_i^n E_i \dots \dots \dots (I. 10)$$

1.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité :

1.5.1. Introduction :

Dans le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), l'énergie est exprimée en fonction de la densité électronique selon L. H. Thomas (1927), E. Fermi (1927, 1928) et P. A. Dirac (1930) sur le modèle du gaz d'électrons non interagissant. Le but de la DFT est de déterminer des fonctionnelles qui permettent de donner une relation entre la densité électronique et l'énergie [6]. La DFT a véritablement débuté avec les théorèmes fondamentaux de Hohenberg et Kohn en 1964 [7], qui établissent une relation fonctionnelle entre l'énergie de l'état fondamental et sa densité électronique. Les deux théorèmes montrent l'existence d'une fonctionnelle de la densité qui permet de calculer l'énergie de l'état fondamental d'un système.

I.5.2. Théorème de Hohenberg et Kohn :

➤ **Premier théorème :**

Le premier théorème de Hohenberg et Kohn montre que la densité électronique est la seule fonction nécessaire pour obtenir toutes les propriétés électroniques d'un système. Par conséquent l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique de la densité électronique, soit :

$$E = E[\rho] \dots \dots \dots (I.11)$$

Ce théorème est à la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Par conséquent, la densité électronique détermine de façon unique l'opérateur hamiltonien du système. Ainsi en connaissant la densité électronique, l'opérateur hamiltonien peut être déterminé, et à travers ce hamiltonien, les différentes propriétés du matériau peuvent être calculées.

Ce premier théorème peut être étendu aux systèmes à spin polarisé où l'énergie totale du système ainsi que toutes les autres propriétés de l'état fondamental sont des fonctionnelles à la fois de la densité de spin up ($\uparrow$) et de la densité de spin down ($\downarrow$) :

$$E = E(\rho \uparrow, \rho \downarrow) \dots \dots \dots (I.12)$$

➤ **Le deuxième théorème :**

Le deuxième théorème de Hohenberg et Kohn montre que pour un potentiel $V_{ext}(\vec{r})$ et un nombre d'électrons N donnés, la fonctionnelle de la densité qui permet d'accéder à l'énergie de l'état fondamental donne la plus basse énergie si la densité est celle de l'état Fondamental :

$$E(\rho) = \min E(\rho) \dots\dots\dots (I.13)$$

Ce théorème se base sur le principe variationnel analogue à celui proposé dans l'approche de Hartree-Fock pour une fonctionnelle de la fonction d'onde, mais appliqué cette fois à une fonctionnelle de la densité électronique.

I .5.3. Equations de Kohn-Sham :

Ce sont Kohn et Sham, en 1965, qui ont élaboré une méthode pratique pour trouver l'énergie de l'état fondamental à partir de la densité électronique de l'état fondamental [8]. L'idée de Kohn-Sham est de remplacer le système réel de particules en interaction par un système fictif de N électrons non interagissant, de même densité électronique que le système réel en interaction.

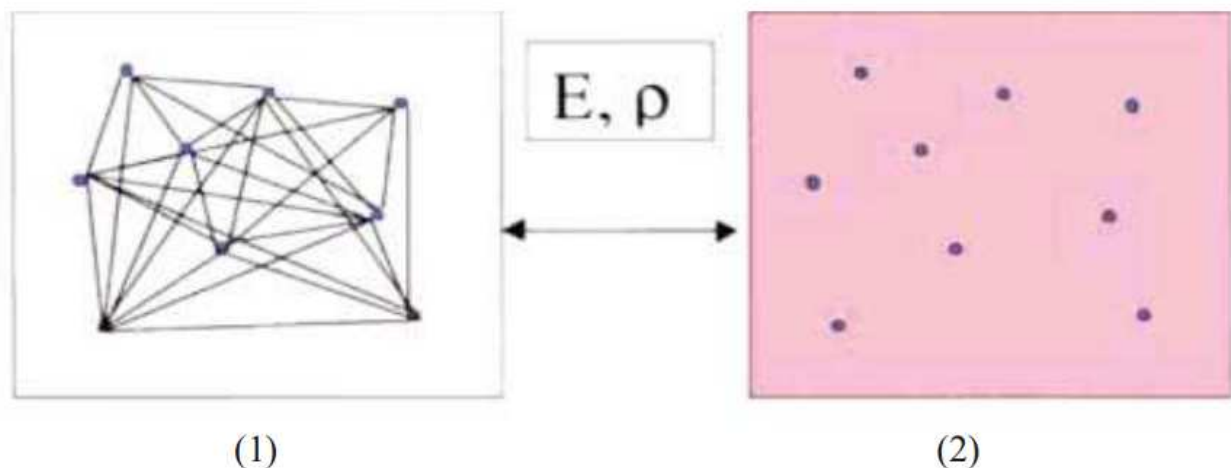


Fig I-1 : (1) système réel constitué de plusieurs électrons en interaction mutuelle, (2) système fictif de même énergie et de même densité électronique que le système réel

L'expression de l'énergie d'un système contenant N électrons interagissant entre eux prend la forme suivant :

$$E(\rho) = T_0 + V_H(\rho) + V_{xc}(\rho) + V_{ext}(\rho) \dots \dots \dots (I.14)$$

Avec : $V_{ext}(\rho) = \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \dots \dots \dots (I.15)$

L'hamiltonien correspondant est désigné par hamiltonien de Kohn et Sham et s'écrit :

$$\hat{H}_{ks} = \hat{T}_0 + \hat{V}_H + \hat{V}_{sc} + \hat{V}_{ext} \dots \dots \dots (I.16)$$

$$\hat{H}_{ks} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc} + V_{ext} \dots \dots \dots (I.17)$$

Le potentiel d'échange et de corrélation V_{xc} est la dérivée de la fonctionnelle de l'énergie d'échange et de corrélation:

$$\hat{V}_{xc} = \frac{\delta V_{xc}(\rho)}{\delta \rho} \dots \dots \dots (I.18)$$

La densité exacte de l'état fondamental d'un système à N électrons est :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\vec{r})^* \varphi_i(\vec{r}) \dots \dots \dots (I.19)$$

Où $\varphi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde d'une seule particule qui décrit mathématiquement des quasiparticules et non les fonctions d'ondes des électrons, et qui est la solution de l'équation de Kohn et Sham à une particule :

$$\hat{H}_{ks} \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \dots \dots \dots (I.20)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' \right] \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \dots \dots \dots (I.21)$$

Cette approche donne une description basée sur N fonctions d'ondes à un électron (φ_i) au lieu de la fonction d'onde de N électrons (Ψ). Ceci implique la résolution de N équations de Schrödinger "mono-électroniques". Cela nous amène à réécrire le problème sous la forme de trois équations connues par équations de Kohn et Sham.

L'équation de Schrödinger à résoudre dans le cadre de cette approche est ainsi de la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}_i^2 + V_{eff} \right] \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \dots\dots\dots (I.22)$$

Où V_{eff} représente le potentiel effectif dans lequel baignent les électrons et a pour expression :

$$V_{eff} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc} + V_{ext} \dots\dots\dots (I.23)$$

et où la densité des N fonctions d'onde mono électroniques est donnée par :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi(\vec{r})|^2 \dots\dots\dots (I.24)$$

Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itération auto-cohérent à partir d'une densité initiale :

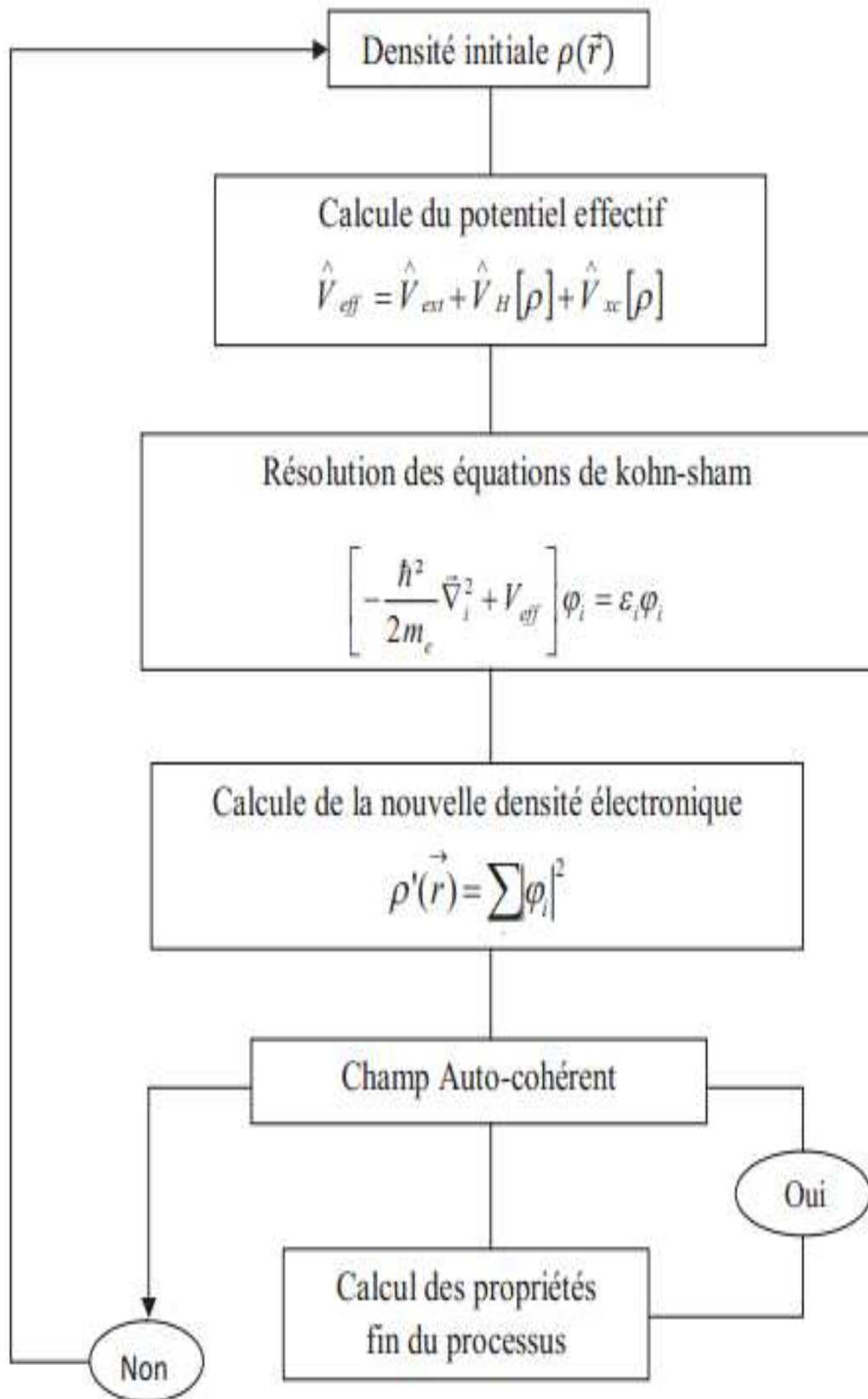


Fig I.2 : Processus auto-cohérent de kohn et sham.

Nous résumons ce cycle par les étapes suivantes :

- 1- commencer par une densité d'essai pour la première itération.
- 2- calculer la densité et du potentiel d'échange et de corrélation pour un point.
- 3- résoudre l'équation de Kohn-Sham.
- 4- calculer la nouvelle densité.
- 5- vérifier le critère de convergence (en comparant l'ancienne et la nouvelle densité).
- 6- calculer les différentes grandeurs physiques et fin du calcul.

Le problème pour la DFT, selon le schéma de Kohn et Sham, est de trouver une bonne approximation pour l'énergie d'échange-corrélation. Plusieurs approximations de ce potentiel existent[9].

1.5.4. Traitement de l'échange et de la corrélation :

La théorie de la fonctionnelle de la densité appliquée dans le cadre de l'approche orbitale de Kohn et Sham demeure exacte dans son formalisme. Progressivement, la partie inconnue dans la fonctionnelle $E[\rho]$ a été réduite à une fonctionnelle universelle $F_{HK}[\rho]$ et finalement à une énergie d'échange et de corrélation $E_{xc}[\rho]$. A ce stade, il est nécessaire d'approcher l'expression de cette fonctionnelle d'échange et de corrélation, de sorte qu'elle offre une description aussi précise que possible du système.

I.5.5. Explication de l'approche de Hohenberg et Kohn :

L'énergie d'échange-corrélation regroupe les termes cinétiques et électrostatiques nonclassiques (T_{el}^{dep} et V_{el-el}^{ncla}). Par non-classique, il faut entendre la considération des corrélations entre les mouvements des électrons du fait de leur nature quantique. En effet, les électrons en tant que fermions (spin demi-entier) ont un comportement collectif régi par deux grands principes. D'une part, deux électrons de même état de spin ne peuvent se trouver dans une même région de l'espace : c'est le principe d'exclusion de Pauli - les électrons de même spin se repoussant. D'autre part, deux électrons de moments de spin opposés peuvent s'apparier et donc occuper la même région de l'espace. Ces interactions inter électroniques d'ordre purement quantiques, car gouvernées par le spin, doivent être prises en compte dans E_{xc} . La partie échange rend compte du gain en énergie coulombienne dû au respect du principe de Pauli (exclusion entre deux électrons de même spin), tandis que la corrélation correspond au juste équilibre entre le gain en énergie coulombienne et le coût en énergie cinétique lorsque deux électrons de spins différents sont séparés.

Le choix de Kohn et Sham est d'autant plus judicieux car l'approximation est faite sur la plus petite contribution à l'énergie totale [10,11]. Dans le cas présent, il ne figure que l'échange dont l'effet dominant est dans $E_{xc} = (E_c \approx 10\%E_x)$.

Une manière d'illustrer notre propos est de considérer qu'un électron en interaction avec le reste du système peut-être représenté comme accompagné d'un trou d'échange et de corrélation. Ce trou, de par sa forme, a pour particularité d'exclure la présence d'électrons de même spin dans la région définie par l'électron et également de définir la position la plus probable d'un électron de spin différent au voisinage de l'électron.

I.5.6. Approximation locale (LDA) :

$$\begin{cases} E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr \\ E_{xc}^{LSDA}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho_\alpha(r), \rho_\beta(r)) dr \dots\dots\dots (I.25) \end{cases}$$

L'approximation de $E_{xc}[\rho]$ est basée sur le modèle du gaz d'électron uniforme où le terme $\varepsilon_{xc}(\rho(r))$ est l'énergie d'échange-corrélation par particule du gaz

d'électron uniforme de densité $\rho(r)$. De plus, $\varepsilon_{xc}(\rho(r))$ peut être considérée comme la somme d'une contribution d'échange et de corrélation :

$$\varepsilon_{xc}(\rho(r)) = \varepsilon_x(\rho(r)) + \varepsilon_c(\rho(r)) \dots\dots\dots (I.26)$$

Le terme d'échange, communément appelé "échange de Dirac" [12] (symbolisé par S du fait que cette expression fut reprise par Slater) est connu exactement :

$$\varepsilon_x^S(\rho(r)) = \frac{-3}{4} \left(\frac{3\rho(r)}{\pi} \right)^{1/3} \dots\dots\dots (I.27)$$

La partie corrélation $\varepsilon_c(\rho(r))$ ne peut-être exprimée de manière exacte. L'approximation de ce terme établie par Vosko, Wilk et Nussair (VWN) [13] a obtenu le plus de succès. Elle est basée sur une interpolation des résultats de calculs Monte-Carlo quantiques très précis sur le gaz uniforme d'électrons réalisés par Ceperley et Alder [14].

L'idée de base de la LDA est qu'il est possible d'estimer l'énergie d'échange-corrélation d'un système inhomogène en utilisant sur des portions infinitésimales les résultats d'un gaz homogène d'électrons de densité égale à la densité locale du système inhomogène. Cette approximation est raisonnable pour un système où la densité varie lentement mais cette condition n'est pas satisfaite en pratique. Cependant, la LDA est étonnamment efficace et son application aux atomes et aux molécules se justifie par le succès de ses applications numériques.

1.5.7. L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

La plus grande source d'erreur de la LDA provient de l'énergie d'échange qui est souvent sous-estimée tandis que l'énergie de corrélation est souvent surestimée même

si, en valeur absolue, sa contribution à l'énergie totale est plus petite. Ces deux erreurs ont tendance à s'annuler. Pour améliorer la précision des calculs DFT, nous avons besoin de meilleures approximations pour la fonctionnelle d'échange-corrélation. Certains auteurs ont eu l'idée de définir une fonctionnelle de la densité qu'ils ont associée à ses dérivées propres dans le but de prendre en compte l'inhomogénéité du système. Dans un premier temps, la LDA fut traitée comme le premier terme d'un développement en série de Taylor :

$$E_{xc}^{GEA}[\rho] = \int \varepsilon_{xc}^{GEA}(\rho(r)) \rho(r) dr + \int c_{xc}(\rho(r)) \frac{|\nabla \rho(r)|}{\rho^{4/3}(r)} dr + \dots \quad (I.28)$$

Cette forme de fonctionnelle est l'approximation du gradient (GEA ou Gradient Expansion Approximation en anglais). Malheureusement, ceci donne de plus mauvais résultats que la LDA. En effet, le trou d'échange-corrélation ne satisfait plus les conditions qui assuraient à la LDA un certain sens physique. Afin de corriger ces problèmes, la fonctionnelle ci-dessus a été modifiée pour la forcer à respecter les principales conditions aux limites. Nous obtenons alors l'approximation du gradient généralisé (GGA ou Generalized Gradient Approximation en anglais) à l'origine du succès de la DFT :

$$E_{xc}^{GEA}[\rho; \nabla \rho] = \int \varepsilon_{xc}^{GEA}(\rho(r), \nabla \rho) dr \dots \dots \dots (I.29)$$

Souvent les contributions pour l'échange et la corrélation sont développées séparément:

$$E_{xc}^{GGA}(\rho, \nabla \rho) = E_x^{GGA}(\rho, \nabla \rho) + E_c^{GGA}(\rho, \nabla \rho) \dots \dots \dots (I.30)$$

Le problème majeur de la LDA provenant de l'échange, une attention toute particulière fut portée sur le développement de cette partie :

$$E_x^{GGA}(\rho, \nabla \rho) = E_x^{LDA} - \int F(s(r)) \rho^{4/3}(r) dr \dots \dots \dots (I.31)$$

Où F est une fonction du gradient de densité réduite (sans dimension) :

$$s(r) = \frac{|\vec{\nabla}\rho(r)|}{\rho^{4/3}(r)} \dots\dots\dots(I.32)$$

Nous pouvons ainsi citer les fonctions de Becke (B88) [15], celle de Perdew (PW86) [16] et celle de Handy et Cohen (OPTX) [17].

Références bibliographiques :

- [1] P. Arnaud, "chimie physique" édition Dunod (2001).
- [2] C. G. Van de Walle (Ed.), Wide band-gap semiconductors, Physica. B 185 (1993) 118.
- [3] S. Kasap, P. Capper (Eds.), Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, (2007).
- [4] Z. Loizos, N. Spyrellis, G. Maurin, D. Pottier, J. Electroanal. Chem. 269 (1989) 399.
- [5] N. Muthukumarasamy, R. Balasundaraprabhu, S. Jayakumar, M. D. Kannan, Mater. Chem. Phys. 102 (2007) 86.
- [6] Parr. R G. and Yang. W. « Density Functional Theory », Oxford University Press, (1989).
- [7] Hohenberg. P. and Kohn. W., Phys. Rev., 136, (1964), B846.
- [8] Kohn. W. and Sham. L.J., Phys. Rev., 140, (1965), 1133.
- [9] T. Starkloff and J.D. Joannopoulos, Phys.Rev. B 16, 5212 (1977).
- [10]. C. O. Almbladh et A. C. Pedroza, Phys. Rev. A29, 2322 (1984).
- [11]. A. Savin, H. Stoll, et H. Preuss, Theor. Chim. Acta. 70, 407 (1986).
- [12]. J. C. Slater, Phys. Rev. 81, 385 (1951).
- [13]. S. J. Vosko, L. Wilk, et M. Nussair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980).

[14]. D. M. Ceperley et B. J. Alder, Phys. Rev. Lett.45, 566 (1980).

[15]. A. D. Becke, Phys. Rev. A38, 3098 (1988).

[16]. J. P. Perdew et Y. Wang, Phys. Rev. B33, 8800 (1986).

[17]. N. C. Handy et A. J. Cohen, Mol. Phys. 99, 403 (2001).

Chapitre II :
Spintronique

II.1. Introduction :

La spintronique est une technologie émergente qui exploite non seulement la charge mais aussi le spin de l'électron pour coder l'information. Le spin qui était totalement négligé dans les applications de la microélectronique classique, donne lieu à des phénomènes physiques nouveaux qui offrent des perspectives intéressantes en matière d'intégrabilité, de vitesse de communication, de consommation et de non volatilité de l'information. C'est en ce sens que la spintronique a suscité un vif intérêt dans la communauté scientifique comme alternative à l'électronique classique qui est aujourd'hui confrontée à des obstacles physiques majeurs dus à une réduction accrue de la taille des composants. En 1988, les équipes d'Albert Fert et de Peter Grünberg découvrent la magnétorésistance géante (GMR), que l'on peut considérer comme le point de départ du domaine. À peine dix ans plus tard, IBM commercialise le premier disque dur utilisant cette technologie, permettant un formidable bond en avant en termes de capacité de stockage (multipliée par un facteur 1000 en trois ans). La manipulation simultanée du spin et de la charge des électrons requiert des matériaux innovants en vue de réaliser de nouveaux composants pouvant répondre aux contraintes de performance et de miniaturisation. Parmi ces matériaux, les semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) qui jouent un rôle important car ils permettraient d'intégrer certains composants de la spintronique dans les technologies de la microélectronique classique.

II.2. L'électronique de spin :

La spintronique possède des applications importantes, les plus répandues étant la lecture des disques durs par la GMR, la magnétorésistance tunnel (TMR: Tunnel Magnétorésistance) et l'écriture des mémoires magnétiques (MRAM : Magnetoresistive Random Access Memories) dans nos ordinateurs.

II.2.1. Magnétorésistance géante (GMR) :

La première manifestation d'un effet caractéristique de spintronique a été la magnétorésistance géante (Giant Magneto-Resistance, ou GMR), découverte en 1988 à Orsay par l'équipe d'A.Fert [1]. Dans des structures alternant un métal, ferromagnétique et un métal non magnétique, par exemple des multicouches de Fe/Cr [2,3], un changement de résistance important est observé lorsque, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, les aimantations macroscopiques des couches magnétiques successives basculent d'un état antiparallèle à un état parallèle aligné.

Afin d'illustrer le principe de fonctionnement de l'effet GMR, on considère deux configurations caractérisées par un empilement de deux couches ferromagnétiques à magnétisation parallèle (fig. II.1.a) et antiparallèle (fig. II.1.b) séparées par une couche conductrice non-magnétique [4]. Les électrons qui participent à la conduction électrique peuvent avoir un spin parallèle (majoritaire $\uparrow$) ou opposé (minoritaire $\downarrow$) par rapport à l'aimantation des couches. Les trajectoires des électrons sont déterminées par leur spin car les phénomènes de diffusion sont forts dans le cas d'un spin opposé à la magnétisation et plus faible dans le cas contraire. Dans la configuration avec des couches à magnétisation Parallèle, les électrons de spin majoritaire ($e^{\uparrow}$) passent à

traverse la structure presque sans diffusion (flèche verte), tandis que les électrons de spin minoritaire (e^{down}) sont plus fortement diffusés (flèche rouge). Dans la configuration antiparallèle, les électrons sont tous diffusés et donc la résistance de la structure est plus élevée.

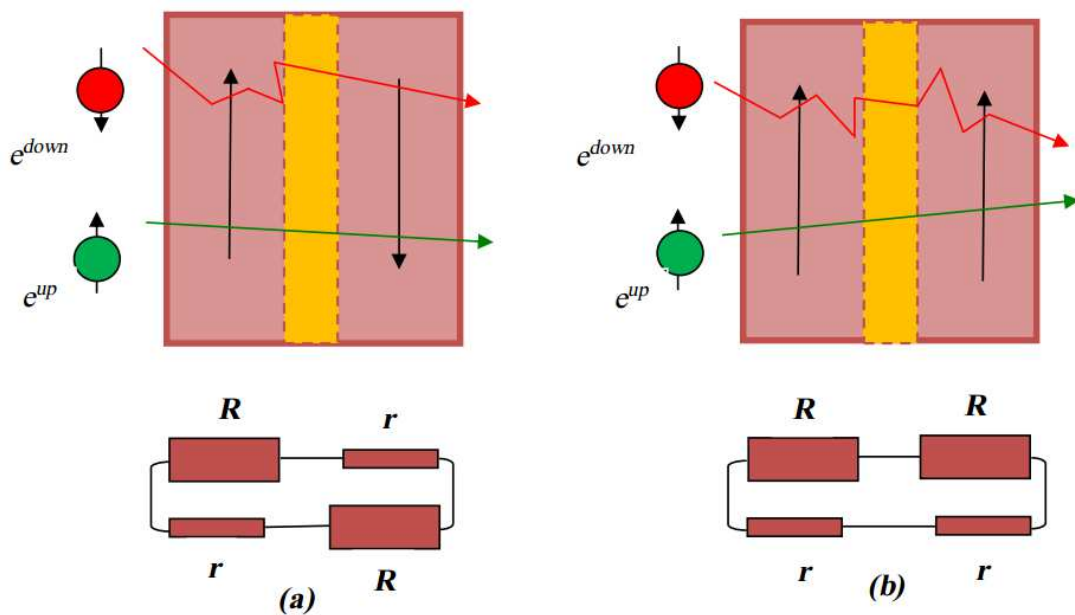


FIG. II.1 : Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante **(a)** Magnétisation parallèle et **(b)** Magnétisation antiparallèle [5].

L'application principale de la GMR développée dans les années 90 concerne les têtes de lecture pour disques durs d'ordinateurs. Dans un support d'information, la variation de champ magnétique généré par les transitions entre bits de données est détectée par un petit élément magnéto-résistif. Cet élément transcrit l'information sous la forme de pulses électriques images du changement de résistance. Aujourd'hui, la totalité de la production mondiale des têtes de lecture/écriture pour disques durs est constituée de têtes magnéto résistives de type vanes de spin [5].

II.2.2. Magnéto-résistance tunnel (TMR) :

La magnéto-résistance tunnel ou TMR (Tunnel Magnéto-résistance) s'observe dans des systèmes appelés jonctions tunnel magnétiques constitués de deux électrodes ferromagnétiques séparées par une fine couche isolante, appelée barrière tunnel, dont l'épaisseur est de quelques nanomètres. Une des électrodes a une aimantation dont le sens peut être modifié par rapport à l'aimantation de l'autre électrode (Figure II.2). Cette première électrode est appelée couche libre, couche douce ou encore couche de stockage. L'autre électrode, dont l'aimantation est fixe, est appelée couche piégée, couche dure ou couche de référence.

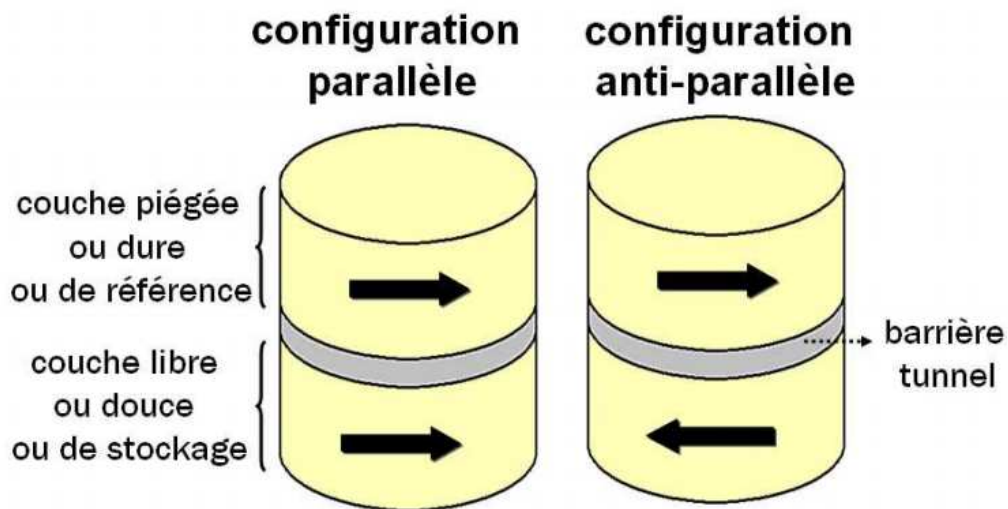


FIG.II.2 : Illustration d'une jonction tunnel magnétique. Les électrodes sont séparées par une barrière isolante. L'électrode dont l'aimantation est fixe est appelée couche piégée, dure ou de référence tandis que l'autre électrode est appelée couche libre, douce ou de stockage.

La première mesure de magnétorésistance tunnel date de 1975 par Jullière [6]. Une TMR de 14% a été observée à 4,2 K sur une trilocouche de Fe/GeOx/Co. En raison de la nature isolante de la barrière tunnel, le courant qui traverse la jonction passe d'une électrode à l'autre par effet tunnel. Pour expliquer le transport électronique dans une jonction tunnel magnétique, une approche quantique est donc nécessaire. Dans ce cas, l'électron est représenté par sa fonction d'onde. On peut montrer que la densité de présence d'un électron dans la barrière tunnel décroît de manière exponentielle au long de la barrière. En considérant que le spin des électrons est conservé lors du transport, d'après la règle d'or de Fermi, cette probabilité de transition par effet tunnel d'un électron d'une électrode ferromagnétique à l'autre est proportionnelle au produit de la densité d'état initiale dans la première électrode par la densité d'état finale dans la deuxième électrode.

Par conséquent, la conductance G est aussi proportionnelle au produit des densités d'état initial et final. La conductance pour deux électrodes ferromagnétiques indexées 1 et 2 vérifie :

$$G \propto n_1^\uparrow n_2^\uparrow + n_1^\downarrow n_2^\downarrow \dots\dots\dots (II .1)$$

Où $n^\uparrow$ et $n^\downarrow$ sont les densités des états avec spin up et spin down respectivement. Dans le cas où les aimantations de deux couches sont parallèles, on a $n_1^\uparrow > n_1^\downarrow$ et $n_2^\uparrow > n_2^\downarrow$ (Figure II.3a). Dans le cas où les aimantations sont antiparallèles, on a $n_1^\uparrow > n_1^\downarrow$ et $n_2^\downarrow > n_2^\uparrow$ (Figure II.3b). Un changement de configuration des aimantations d'un état parallèle vers un état antiparallèle entraîne donc un changement du courant électrique à travers la barrière tunnel.

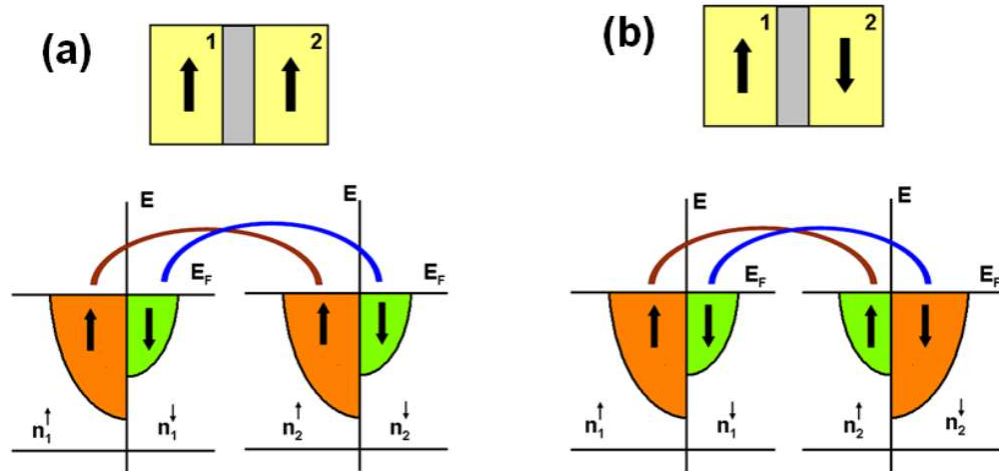


FIG II.3 : Schéma de la dépendance de la conductance en fonction de l'orientation relative des électrodes magnétiques.

En considérant que le spin de l'électron est conservé lors de la traversée de la barrière tunnel et que la conductance dépend de la densité d'état électronique au niveau de Fermi, les deux configurations parallèle (a) et antiparallèle (b) ne présentent pas les mêmes propriétés de transport électronique.

Dans ce modèle, dit modèle de Jullière, la TMR est définie par :

$$TMR = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}} = \frac{2P_1P_2}{1 - P_1P_2} \dots\dots\dots (II.2)$$

P_i ($i= 1$ et 2) est la polarisation des électrodes ferromagnétiques définie par :

$$P = \frac{n_i^{\uparrow} - n_i^{\downarrow}}{n_i^{\uparrow} + n_i^{\downarrow}} \dots\dots\dots (II.3)$$

Pour un matériau non magnétique, $P = 0$ tandis que pour un matériau dont les spins au niveau de Fermi sont complètement polarisés on a $P = |1|$.

Les premières jonctions tunnel magnétiques à température ambiante ne sont apparues qu'en 1995 suite à des travaux de Miyazaki et Moodera [7, 8] avec des magnétorésistances tunnel jusqu'à 24% avec une jonction à base d'alumine. Les valeurs de TMR reportées dans la littérature sont souvent bien plus importantes que les valeurs de GMR. Aujourd'hui, une TMR d'environ 600% a été mesurée à température ambiante pour une jonction à base d'oxyde de magnésium combinée avec des électrodes en CoFeB [9]. Le fait que la TMR soit plus importante que la GMR dans une vanne de spin vient de ce que dans une jonction tunnel, la probabilité pour les électrons de passer d'une électrode à l'autre dépend de manière exponentielle de l'épaisseur de barrière à traverser. Cette probabilité est maximale pour les électrons d'incidence normale à la surface de la jonction. Le courant est donc principalement porté par les électrons de vecteur d'onde orthogonal à l'interface. Il y a donc une sélectivité des vecteurs d'onde qui sert de "filtre" pour certains électrons et qui n'apparaît pas dans la magnétorésistance géante. On observe également une sélectivité liée à la géométrie de fonctions d'onde pour les barrières qui présentent des structures cristallographiques particulières.

II.3. Transfert de spin :

Nous avons vu que l'aimantation d'un matériau ferromagnétique peut influencer le passage d'un courant d'électrons en raison de leur spin. Cette influence fait que le spin des électrons s'oriente selon l'aimantation du matériau. On parle alors de courant polarisé en spin. Or l'effet réciproque peut aussi avoir lieu, c'est-à-dire, un courant polarisé en spin peut renverser l'aimantation d'une couche ferromagnétique. Dans ce cas, la conservation du moment magnétique implique que lorsque les électrons

traversent une couche magnétique, une partie de leur moment magnétique est cédée à l'aimantation, d'où le terme de transfert de spin ou alors spin torque car le spin des électrons exerce un couple sur l'aimantation du matériau. Cette idée a été formulé par Berger et Slonczewski qui en 1996 ont proposé une formulation théorique qui prédit qu'un courant polarisé en spin induit une excitation magnétique dans une couche magnétique et peut provoquer le renversement de son aimantation [10, 11]. En 2000, Katine et al. Présentent les premières mesures de renversement de l'aimantation grâce à un courant polarisé en spin dans une vanne de spin [12]. Ce phénomène apparaît pour des fortes densités de courant de l'ordre de 10^6 à 10^8 A/cm^2 ce qui nécessite donc la fabrication des piliers de petites dimensions latérales, de l'ordre de 200 nm. Malgré les prédictions de transfert de spin dans des jonctions tunnels magnétiques, les forts courants injectés posent un problème de claquage électrique de la barrière tunnel. Ce n'est que récemment que le spin torque a pu être observé dans les jonctions tunnel grâce à des efforts au niveau technologique pour réduire la résistance de la barrière. En 2004, Huai et al. Puis Fuchs et al. Ont observé les premiers renversements d'aimantation dans les jonctions tunnels magnétiques [13, 14].

Pour quantifier le transfert de spin, considérons un système avec deux couches magnétiques séparées par un matériau non magnétique. La première couche a une aimantation supposée fixe (couche dure ou de référence) insensible au transfert de spin tandis que l'aimantation de la deuxième électrode peut changer son orientation par effet du courant polarisé en spin (couche douce ou libre). La couche de référence joue le rôle de polariseur de spin des électrons qui la traversent ou qui sont réfléchis par cette même couche. On note $\vec{P}$ le vecteur de polarisation de spin lors de son passage (ou réflexion) par la couche de référence. Lorsque les électrons arrivent dans la couche libre d'aimantation $\vec{M}$, ils sont polarisés à nouveau par celle-ci et changent leur orientation.

La conservation du moment magnétique implique que le moment transversal correspondant au changement de l'orientation des spins, est transmis à l'aimantation de la couche libre. Le couple de transfert de spin $\vec{T}$ peut être exprimé par :

$$\vec{T} = a_j \vec{M} \times (\vec{P} \times \vec{M}) + b_j \vec{M} \times \vec{P} \dots\dots\dots (II.4)$$

Le premier terme correspond à la composante longitudinale du transfert de spin et le facteur a_j dépend du courant (signe et intensité). Le deuxième terme, orthogonal au plan formé par $\vec{M}$ et $\vec{P}$, est appelé "field-like term" car il agit comme un champ externe d'amplitude b_j appliqué dans la direction de la polarisation. Dans des systèmes complètement métalliques, la prise en compte seulement du premier terme de l'Equation (II.4) a permis d'expliquer, au moins qualitativement, les phénomènes expérimentaux dus au transfert de spin [15, 16, 17, 18]. Par contre, il a été démontré théoriquement [19, 20, 21] et puis expérimentalement [22, 23, 24] que, pour les jonctions tunnel magnétiques, le terme lié à la composante perpendiculaire du couple de transfert de spin n'est pas négligeable en comparaison à la composante longitudinale [25,26].

II.4. L'injection de spin et les composants actifs :

L'étape suivante devrait logiquement être l'intégration de matériaux magnétique et semi-conducteurs dans une même hétéro structure, dite «hybride». L'objectif est ici d'obtenir des composantes qui combinent les propriétés des matériaux magnétiques pour le stockage de données ou le filtrage de spin et la capacité des semi-conducteurs à manipuler des signaux électrique ou optiques. Par exemple, un concept de transistor de spin a ainsi été proposé, dans lequel un courant polarisé en spin circule dans un canal semi-conducteur entre une source et un drain ferromagnétique, le spin des porteurs dans

le canal semi-conducteur pouvant être modulé par une tension de grille et \ ou un champ magnétique [27]. Une modification de l'orientation magnétique de la source ou du drain change les propriétés de transistor, ce qui permet d'imaginer des composants reprogrammables à volonté par modification de reconfiguration d'éléments magnétiques. D'autres composants ont été récemment proposés, comme une diode électroluminescente magnétique (spin-LED), un l'interrupteur de spin ou encore un filtre à spin [28].

II.6. Mémoires Magnétiques à Accès Aléatoires (MRAM) :

La magnétorésistance tunnel a rapidement trouvé des applications dans le stockage magnétique. Il est possible de fabriquer des matrices de jonctions (TMR) de taille submicronique pour coder l'information par une série de 0 et de 1 : état « 0 » correspond à la configuration parallèle (résistance faible) et état « 1 » correspond à la configuration antiparallèle (résistance forte). En pratique, plus la différence entre les deux niveaux de résistance est élevée, plus la lecture de l'état est rapide. La non-volatilité de ces systèmes magnétiques et la démonstration d'écriture sub-nanoseconde permettent d'envisager leur utilisation en tant que mémoire de stockage d'une grande fiabilité et de support pour le traitement de données logiques. De tels systèmes sont appelés MRAM.

Submicronique pour coder l'information par une série de 0 et de 1 : état « 0 » correspond à la configuration parallèle (résistance faible) et état « 1 » correspond à la configuration antiparallèle (résistance forte). En pratique, plus la différence entre les deux niveaux de résistance est élevée, plus la lecture de l'état est rapide. La non-

volatilité de ces systèmes magnétiques et la démonstration d'écriture sub-nanoseconde permettent d'envisager leur utilisation en tant que mémoire de stockage d'une grande fiabilité et de support pour le traitement de données logiques. De tels systèmes sont appelés MRAM.

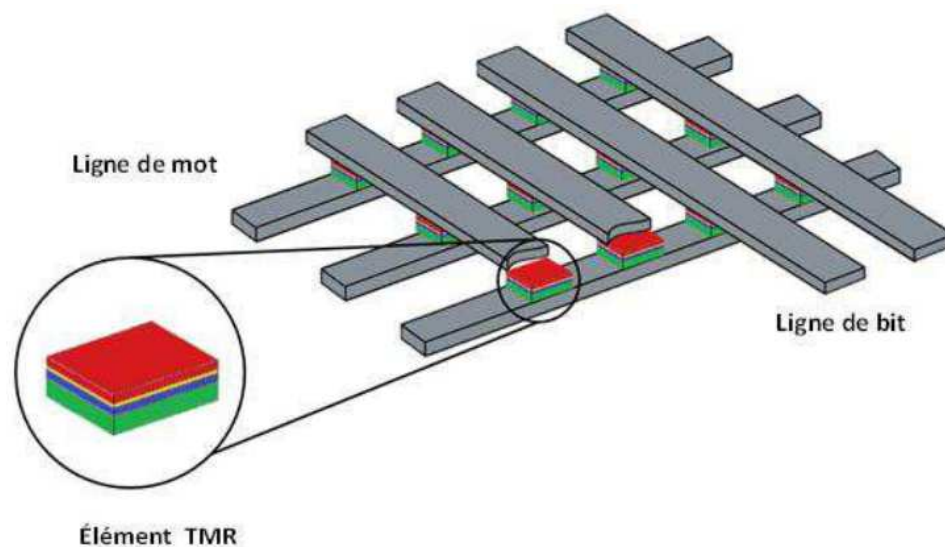


FIG II.4 : architecture d'une mémoire MRAM constituée d'une matrice de jonctions tunnels magnétiques [29].

Le principe de lecture d'un bit est de faire circuler un courant entre une ligne de mot et une ligne de bit. La mesure de la résistance ainsi obtenue correspond à l'état de résistance faible ou fort. Cependant, en appliquant une tension entre deux lignes, un ensemble de chemins possibles pour le courant traversant une ou plusieurs jonctions

tunnel magnétiques se superposent. Pour éviter ce problème de lecture, un transistor en série a été ajouté avec chaque cellule pour pouvoir les adresser chacune individuellement lors de la lecture.

II.7. L'intégration de semi-conducteurs dans la spintronique :

La spintronique s'est largement développée, en particulier dans les domaines de l'enregistrement magnétique et des mémoires magnétiques intégrées. De nombreux chercheurs voient dans l'extension de la spintronique au domaine des semi-conducteurs un potentiel de développement encore plus prometteur. En effet, l'exploitation du spin de l'électron dans des structures hybrides métal/semi-conducteur ouvre un champ d'application totalement nouveau. La spintronique dans les semi-conducteurs a plusieurs intérêts : une longueur de cohérence de spin plus élevée par rapport aux métaux et en plus un seul composant pourrait combiner la détection de l'information (stockage dans une mémoire MRAM), son traitement (par manipulation des spins) et sa transmission (du magnétique vers optique).

Il s'ouvrira alors un vaste champ de possibilités, comme par exemple la réalisation d'un transistor de spin à effet de champ (Spin FET : Spin Field Effect Transistor), (fig. II.5) comme décrit par Datta et Das [30]. Ce dispositif est constitué d'une source et d'un drain en matériau ferromagnétique de moments magnétiques parallèles séparés par un canal constitué d'une hétéro-structure semi-conductrice formant un gaz d'électrons libres bidimensionnel. La source (injecteur de spin) injecte des électrons spin-polarisés dans le canal vers le drain (détecteur de spin). Une tension de grille crée dans le canal un champ électrique qui va provoquer ou non la rotation des spins électroniques par le phénomène de précession de Rashba. Cet effet rend ce

dispositif particulièrement intéressant. En effet, Il est possible de faire précesser les spins jusqu'à ce qu'ils soient parallèles ou antiparallèles à la direction de l'aimantation de l'électrode de drain. Ainsi, si les spins des porteurs injectés restent orientés dans le sens de l'aimantation de la source et du drain, le courant passe (le transistor est ON), alors que dans le cas contraire le courant est plus faible (le transistor est OFF).

Une oscillation du courant est ainsi observée en fonction de la tension de grille. Un tel dispositif n'a pas Encore été réalisé expérimentalement et reste un des principaux défis de la recherche en spintronique.

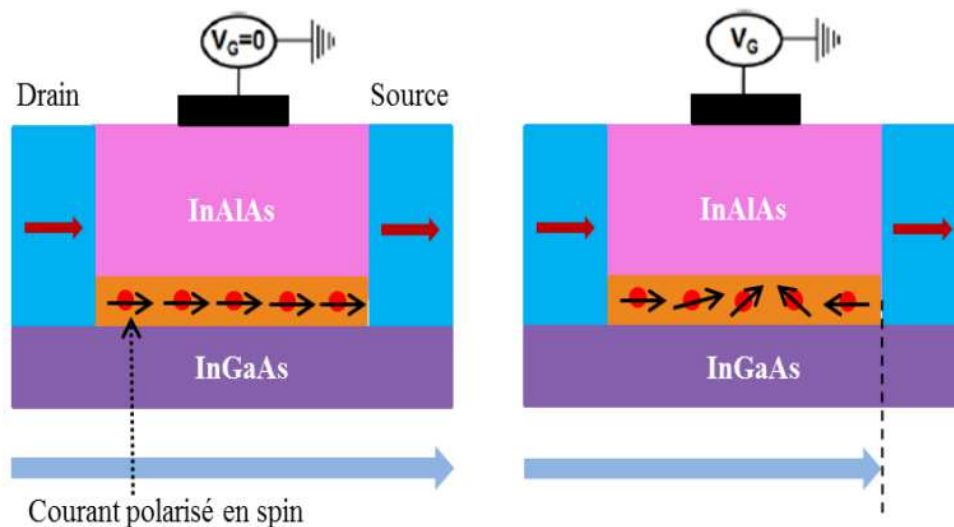


FIG. II.5 : Représentation schématique du Spin FET.

Le transistor à spin, quoiqu'assez intéressant sur le plan théorique, pose de nombreux problèmes en terme de réalisation. L'un des obstacles et non des moindres est le problème de l'injection de spin dans le canal de conduction car il est extrêmement

difficile d'injecter efficacement des courants polarisés en spin dans un semi-conducteur à partir d'un métal ferromagnétique. Les problèmes liés à l'injection de spin sont cruciaux pour la fabrication de dispositifs pour la spintronique basée sur les semi-conducteurs [31].

Références bibliographiques :

- [1] M.N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N.Van dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet A. Friederich, J. Chazelas, « Giant magnetoresistance of (001) fe/(001)Cr magnetic superlattices». Phys. Rev. Lett. 61 21 (1988), 2472-2475.
- [2] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, «Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange». Phys. Rev. B 39 7 (1989), 4828-4830.
- [4] Maria marins de castro suza, « Commutation précessionnelle de mémoire magnétique avec polariseur à anisotropie perpendiculaire ». Thèse de doctorat, Université de Grenoble (2011).
- [5] Sébastien Bandiera. « Jonctions tunnel magnétiques à anisotropie perpendiculaire et écriture assistée thermiquement ». Thèse de doctorat. Université de grenoble (2006).
- [6] M. Julliere. Tunneling between ferromagnetic films. Physics Letters A, 54 :225, 1975.
- [7] T. Miyazaki and N. Tezuka. Giant magnetic tunneling effect in Fe/Al₂O₃/Fe junction. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 139:L231, 1995.
- [8] J.S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, and R. Meservey. Large magnetoresistance at room temperature in ferromagnetic thin film tunnel junctions. Physical Review Letters, 74:3273, 1995.
- [9] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. Ashizawa, Y.M. Lee, K. Miura, H. Hasegawa, M. Tsunoda, F. Matsukura, and H. Ohno. Tunnel magnetoresistance of 604% at 300 K by

suppression of Ta diffusion in CoFeB/ MgO/ CoFeB pseudo-spin-valves annealed at high temperature. *Applied Physics Letters*, 93:082508, 2008.

[10] J.C. Slonczewski. Current-driven excitation of magnetic multilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 159:L1, 1996.

[11] L. Berger. Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current. *Physical Review B*, 54:9353, 1996.

[12] J.A. Katine, F.J. Albert, R.A. Buhrman, E.B. Myers, and D.C. Ralph. Currentdriven magnetization reversal and spin-wave excitations in Co/Cu/Co pillars. *Physical Review Letters*, 84:3149.

[13] Y. Huai, F. Albert, P. Nguyen, M. Pakala, and T. Valet. Observation of spin-transfer switching in deep submicron-sized and low-resistance magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 84:3118, 2004.

[14] G.D. Fuchs, N.C. Emley, I.N. Krivorotov, P.M. Braganca, E.M. Ryan, S.I. Kiselev, J.C. Sankey, D.C. Ralph, R.A. Buhrman, and J.A. Katine. Spin-transfer effects in nanoscale magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 85:1205, 2004.

[15] S.I. Kiselev, J.C. Sankey, I.N. Krivorotov, N.C. Emley, M. Rinkoski, C. Perez, R.A. Buhrman, and D.C. Ralph. Current-Induced nanomagnet dynamics for magnetic fields perpendicular to the sample plane. *Physical Review Letters*, 93:036601, 2004.

[16] Q. Mistral, Joo-Von Kim, T. Devolder, P. Crozat, C. Chappert, J.A. Katine, M.J. Carey, and K. Ito. Current-driven microwave oscillations in current perpendicular-to-plane spin-valve nanopillars. *Applied Physics Letters*, 88:192507, 2006.

[17] D. Houssameddine, U. Ebels, B. Delaet, B. Rodmacq, I. Firastrau, F. Ponthenier, M. Brunet, C. Thirion, J.-P. Michel, L. Prejbeanu-Buda, M.-C. Cyrille, O. Redon, and

B. Dieny. Spin-torque oscillator using a perpendicular polarizer and a planar free layer. *Nature Materials*, 6:447, 2007.

[18] I.N. Krivorotov, D.V. Berkov, N.L. Gorn, N.C. Emley, J.C. Sankey, D.C. Ralph, and R. A. Buhrman. Large-amplitude coherent spin waves excited by spin-polarized current in nanoscale spin valves. *Physical Review B*, 76 :024418, 2007.

[19] A. Kalitsov, I. Theodonis, N. Kioussis, M. Chshiev, W.H. Butler, and A. Vedyayev. Spin-polarized current-induced torque in magnetic tunnel junctions. *Journal of Applied Physics*, 99:08G501, 2006.

[20] I. Theodonis, N. Kioussis, A. Kalitsov, M. Chshiev, and W.H. Butler. Anomalous bias dependence of spin torque in magnetic tunnel junctions. *Physical Review Letters*, 97:237205, 2006.

[21] M. Chshiev, I. Theodonis, A. Kalitsov, N. Kioussis, and W.H. Butler. Voltage dependence of spin transfer torque in magnetic tunnel junctions. *IEEE Transactions on Magnetism*, 44:2543, 2008.

[22] J.C. Sankey, Y.T. Cui, J.Z. Sun, J.C. Slonczewski, R.A. Buhrman, and D.C. Ralph. Measurement of the spin-transfer-torque vector in magnetic tunnel junctions. *Nature Physics*, 4:67, 2008.

[23] H. Kubota, A. Fukushima, K. Yakushiji, T. Nagahama, S. Yuasa, K. Ando, H. Maehara, Y. Nagamine, K. Tsunekawa, D.D. Djayaprawira, N. Watanabe, and Y. Suzuki. Quantitative measurement of voltage dependence of spin-transfer torque in MgO-based magnetic tunnel junctions. *Nature Physics*, 4:37, 2008.

[24] A.M. Deac, A. Fukushima, H. Kubota, H. Maehara, Y. Suzuki, S. Yuasa, Y. Nagamine, K. Tsunekawa, D.D. Djayaprawira, and N. Watanabe. Bias-driven high-

power microwave emission from MgO-based tunnel magnetoresistance devices. *Nature Physics*, 4:803, 2008.

[25] L. Landau and E. Lifshitz. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z. Sowjetunion*, 8:101, 1935.

[26] T.L. Gilbert. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetism*, 40:3443, 2004.

[27] S. Datta, B. Electronic analog of the electro-optic modulator, *Appl phys. Lett.* 56, 665(1990).

[28] P GALLO, these de doctorat, université Toulouse, (2006)

[29] W.J. Gallagher and S.P.P. Parkin, “Development of the magnetic tunnel junction MRAM at IBM: From first junctions to a 16-Mb MRAM demonstrator chip”, *IBM J. Res. & Dev.* 50 (2006), 1-5.

[30] S. Datta, B. Das, “Electronic analog of the electro-optic modulator”, *App. Phys. Lett.* 56 (1990), 665-667.

[31] G. Lampel,” Nuclear dynamic polarization by optical electronic saturation and optical pumping in semiconductors”, *Phys. Rev. Lett.* 20 10 (1968), 491-493.

Chapitre III :
Prédiction des propriétés Physiques
de l'alliage CoVTe

*Prédiction des propriétés Physiques de l'alliage CoVTe**par la méthode FP-LAPW***III.1. Introduction :**

Les matériaux magnétiques à base de la phase cristallographique Cl_p

particulièrement les alliages half-Heusler ont eu un grand intérêt pour les théoriciens et les expérimentateurs depuis leurs découvertes par Heusler [1-25]. Les alliages full et half-Heusler présentent un effet de mémoire de forme magnétique, la super-élasticité induite par le champ magnétique et les changements à l'aimantation induite par la grand tension, ont récemment fait l'objet très attractif de recherches actuelles [2-18].

Dans le présent travail, nous étudions les propriétés structurale, électroniques, magnétique et le comportement half-métallique du composé CoVTe par la méthode des premiers principes. L'importance de ce matériau est remarqué à travers l'étude des caractéristiques de la structure de bande électronique et le comportement magnétique, ce même phénomène est remarqué pour d'autres composés half-Heusler, notamment le composé NiMnSb. La plus grande différence entre les deux composés étant le moment magnétique total du composé CoVTe ($2 \mu_B$) est inférieur au moment magnétique total du composé NiMnSb ($4 \mu_B$) [3-19]. Selon la structure Cl_p et le nombre total des électrons de valence, le composés CoVTe avéré être un ferromagnétique half-métallique.

La structure de bande électronique de ce composé peut être caractérisée comme métallique pour le spin-up, tandis qu'il est semi-conducteur pour le sens opposé du spin.

L'étude des variations du gap half métallique et le moment magnétique en fonction du paramètre de maille sous l'effet d'une contrainte dans l'intervalle $[-2, +4\%]$ montre que CoVTe est un composé half métallique ferromagnétique stable dans cet intervalle.

Les paramètres thermodynamiques ont été calculé pour la première fois, il s'est avéré que les variations sont en bon accord avec la théorie de Debye appliqué à la plus part du matériaux.

L'étude des propriétés mécaniques révèle que le composé est mécaniquement stable, dure et que les liaisons ioniques dominant.

III.2. L'électronique de spin (spintronique) :

L'électronique de spin est une discipline récente née de la rencontre de l'électronique et de magnétisme [4]. Cette technologie ne donne pas seulement la possibilité d'améliorer le rendement des dispositifs électroniques mais surtout d'ouvrir de nouvelles possibilités. Actuellement, les chercheurs dans ce domaine ont surtout penché sur l'amélioration des dispositifs de stockage informatique [5]. La technologie de l'électronique de spin sollicite des matériaux combinant des propriétés magnétiques et des propriétés de transport électronique.

Cette combinaison demande dans la plupart du temps d'associer plusieurs propriétés dans une seule structure ayant les caractéristiques désirées.

C'est ainsi que la plupart des dispositifs fonctionnels en électronique de spin, capteurs et mémoires pour l'essentiel reposent sur des hétéro-structures comportant des couches minces de métaux ferromagnétiques [6].

Ce domaine de l'électronique a émergé dans les années 1988-1989 (Baibich 88-Binash 89) avec la découverte d'un effet résistif dépendant de l'aimantation dans un système multicouche : la magnétorésistance géante (GMR) (giant magneto Resistance). L'intérêt pour ce phénomène physique a pris une ampleur considérable une dizaine d'années plus tard avec son exploitation progressive pour la réalisation de capteurs magnétiques dans les dispositifs commerciaux très courants comme les têtes de lecture des disques durs. D'autres voies sont possibles pour créer des matériaux aux propriétés utiles en électronique de spin.

les semi-conducteurs II-III ont été les premiers à être étudiés comme CdTe ou le HgTe dopés par du Mn. Les recherches ont été orientées vers les composés III-V suite à l'observation du ferromagnétisme dans le $\text{In}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ ($x \approx 0,18$) et dans le $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ ($0,015 \leq x \leq 0,07$) [7]. Dès le début de l'année 1996, le composé $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ est le semi-conducteur ferromagnétique le plus étudié, son ferromagnétisme ainsi que celui des autres alliages III-V et II-V est en grande partie compris.

III.3. Définition d'un matériau half-métallique :

Dans les années 1980, de Groot et al [16] sont les premiers qui ont découvert l'existence de ce nouveau type de matériau half-métal. Par définition, de tels matériaux ont le niveau de Fermi à l'intérieur de l'intervalle d'énergie qui sépare la bande de conduction et la bande de valence ce qui apparaît clairement dans la densité d'états et la structure de bande pour une orientation de spin mais possèdent un caractère métallique pour l'autre orientation de spin ce qui veut dire que le niveau de Fermi coupe les bandes d'énergies soit de conduction soit de valence), ce

qui montre qu'il y a une polarisation entre les spins qui se produise. Cette polarisation (p) peut être définie comme suit :

$$P = \frac{N^{\downarrow}(E_F) - N^{\uparrow}(E_F)}{N^{\downarrow}(E_F) + N^{\uparrow}(E_F)} \dots \dots \dots (III. 1)$$

Depuis son introduction par De Groot et ses collègues, la notion de half-métallique ferromagnétique a suscité un grand intérêt. Un half-métallique ferromagnétique idéale n'a qu'une seule direction de spin pour la conduction : la structure de bande en spin polarisé présente un comportement métallique pour un canal de spin, tandis que l'autre présente un gap au tour du niveau de fermi.

III.4 Description des éléments du composé CoVTe :

III.4.1 Le Cobalt :

Le cobalt de structure électronique $[Ar] 4s^2 3d^7$ est le second élément du huitième groupe secondaire, ce métal de transition fait partie du groupe du fer. Le corps simple cobalt a des propriétés physiques assez voisines de celles du fer et du nickel. D'un point de vue chimique, il est moins réactif que le fer. Le cobalt est aussi un élément du groupe 9, dont les trois premiers Co, Rh et Ir constituent le groupe du cobalt.



FIG. III. 1. Représentation de l'élément Co.

III.4.2. Le vanadium :

Le vanadium est l'élément chimique de numéro atomique 23, de symbole V. C'est un métal rare, dur et ductile que l'on trouve dans certains minerais. Il est principalement utilisé dans les alliages.

Le vanadium est un métal blanc, brillant. Il possède une bonne résistance à la corrosion par les composés alcalins, ainsi qu'aux acides chlorhydrique et sulfurique. Il s'oxyde rapidement à environ 660 °C. Le vanadium possède une bonne force structurelle ainsi qu'une faible section efficace d'interaction avec les neutrons de fission, ce qui le rend utile dans les applications nucléaires. C'est un

métal qui présente à la fois des caractéristiques acide et basique. Il est de Configuration électronique $4s^2 3d^3$.



FIG. III. 2. Représentation de l'élément V.

III .4.3. Le tellure :

Le tellure est l'élément chimique de numéro atomique 52, de symbole Te. Ce quatrième élément du groupe (VI A) est considéré comme un métalloïde du groupe des chalcogènes. Il est de Configuration électronique $5s^2 4d^{10} 5p^4$.



FIG. III. 3. Représentation de l'élément Te.

III.5. Structure du composé CoVTe :

Les alliages Heusler X_2YZ sont définis comme étant des composés intermétalliques [1] qui ont la structure $L2_1$. Par contre A la composition stœchiométrique, les alliages half- Heusler (XYZ) cristallisent dans la structure $C1_p$ comme le montre la fig.4. Les éléments associés à X, Y et Z sont Co, V et Te, respectivement. La cellule de l'unité se compose de quatre sous-réseaux cubiques

faces centrées avec les positions (0, 0,0) pour Co, $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ pour V et $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ pour Te. Le site $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ est inoccupé dans les composés half-Heusler.

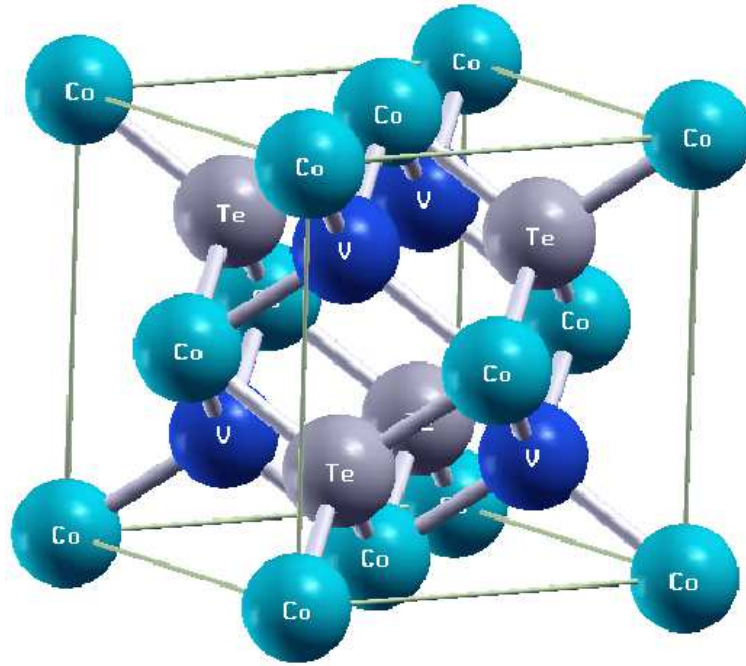


FIG. III. 4. La structures Cl_b adaptées par les alliages half-Heusler CoVTe.

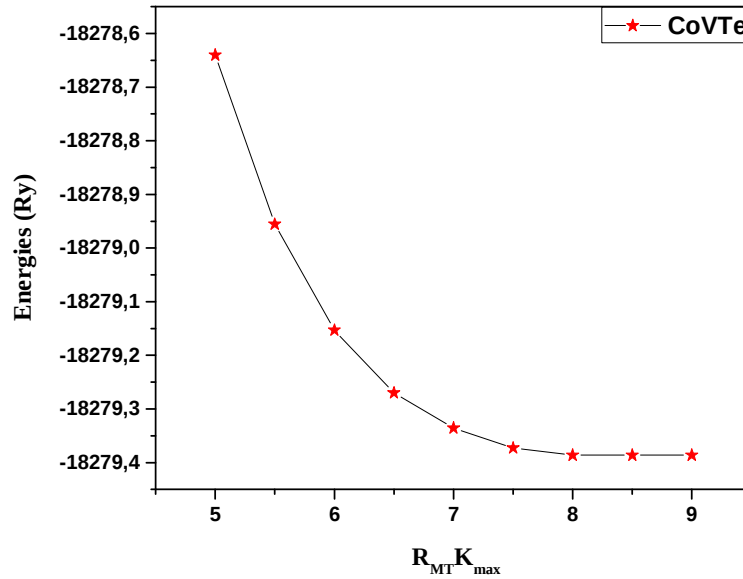


FIG. III. 5 : la variation de l'énergie en fonction du paramètre $R_{MT} K_{max}$.

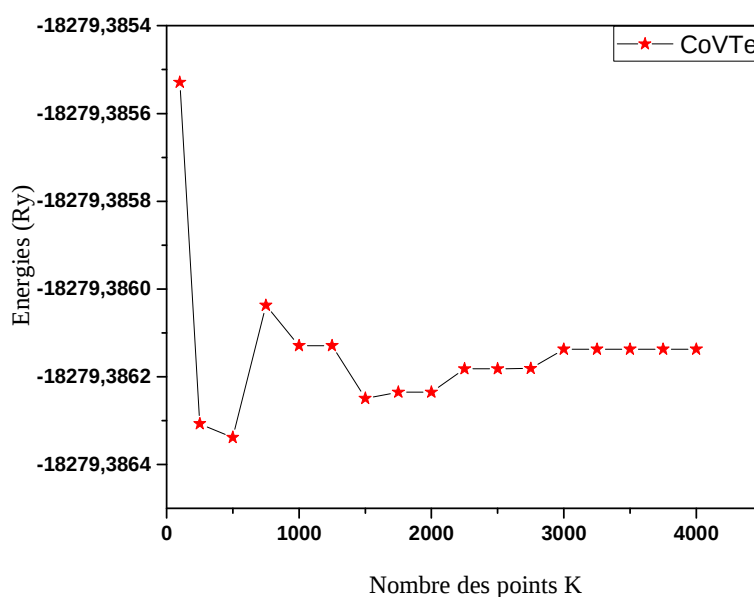


FIG. III.6 : la variation de l'énergie en fonction du nombre de points K.

III.6. Les détails de calcul :

L'optimisation de la géométrie, les calculs de structure électronique et les propriétés magnétiques sont réalisées en utilisant la méthode FP-LAPW mis en œuvre dans le package WIEN2K [21]. L'approximation du gradient généralisé (GGA) en fonction du paramétrage Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [22] est utilisée pour la corrélation d'échange fonctionnel, et les effets relativistes sont pris en compte dans l'approximation scalaire. Nous n'avons pas inclus dans le travail présenté dans la première partie de l'effet de couplage spin-orbite. Nous prenons $R_{mt}K_{max}$ égal à 8,0 et $l=10$. Nous avons choisi le rayon RMT proportionnel aux rayons ioniques correspondants et est aussi grand que possible à condition que les sphères ne se chevauchent pas. Un test de convergence de l'énergie totale par rapport au nombre de points k dans la première partie de la zone de Brillouin

montrent que 3000 points k sont suffisants pour obtenir la précision de l'énergie de 10^{-5} Ry.

III.7. Résultats et discussion :

III .7.1. Les propriétés électroniques et magnétiques :

On a calculé d'abord l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire pour les états ferromagnétique et paramagnétiques du composé ReCrTe. Ces variations sont représentées sur la figure 7. le tableau (1) illustre les valeurs estimées pour la constante d'équilibre du réseau a_0 , le volume V_0 , l'énergie E_0 et la différence d'énergie entre l'état ferromagnétique et l'état paramagnétique ΔE . qui sont déterminés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume à l'équation de Murnaghan [23].

Les structures de bandes du composé CoVTe ferromagnétique pour les spins up et down sont présentées sur la fig.8 et fig.9. Les électrons de spin up présentent le caractère métallique alors que le canal de spin minoritaire (down), il y a un écart d'énergie autour du niveau de fermi d'environ 0.213 eV.

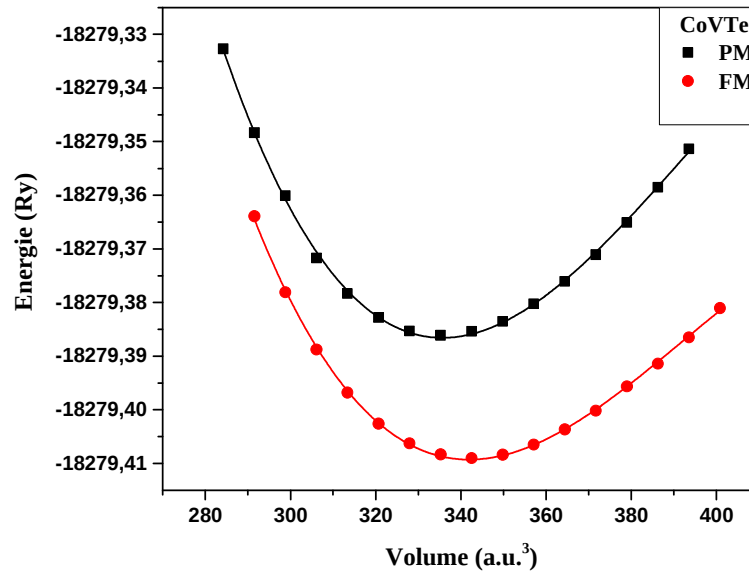


FIG. III.7. l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire pour les états paramagnétique (PM) et ferromagnétique (FM) du composé CoVTe.

On peut conclure que ce système est à moitié métallique ferromagnétique, c.a.d. il a un caractère métallique pour le canal de spin majoritaire et semi-conducteur pour le canal de spin minoritaire, ce phénomène est similaire à la ferromagnétique half-métallique de NiMnSb et FeMnSb [24].

	$a_0/\text{\AA}$	E_0/eV	$V_0/\text{a.u.}^3$	$\Delta E/\text{eV}$
CoVTe	5.8737	- 18279.408791ry	341.8735	0.31157

Tableau 1. Les valeurs calculées du paramètre de maille a_0 , volume V_0 , l'énergie E_0 et la différence d'énergie entre l'état ferromagnétique et l'état paramagnétique ΔE .

composé	moment magnétique Local (μ_B)				Total (μ_B)
	Co	V	Te	int	
CoVTe	0.10018	1.66393	-0.02202	0.25549	1.99758

Tableau 2. Le moment magnétique total (μ_{tot}), le moment magnétique local de chaque élément et le moment magnétique dans la région interstitielle(μ_{int}).

III .7.2. L'origine du caractère half-métallique :

En 1983, Groot et al. [25, 26] ont découvert le caractère ferromagnétique half-métallique dans les composés half-Heusler NiMnSb et PtMnSb. Depuis, plusieurs efforts ont été consacrés à l'étude des propriétés électroniques, magnétique et le comportement half métallique de ces systèmes sur la base des calculs de la densité d'état et de la structure de bande [20].

L'interaction des divers éléments sont responsables du caractere magnétique et half-métallique du composé CoVTe ; ces éléments principaux sont essentiellement la symétrie de la structure cristalline $C1_b$; les liaisons covalentes ; et l'interaction des électrons des états V-3d et les états Co-3d [23].

Dans la Figure 10, nous représentons les densités d'états totales et partielles calculé pour le composé CoVTe.

Le moment magnétique total et partiel calculé pour le composé CoVTe sont répertoriés dans le tableau 2. μ_{tot} égal à $2 \mu_B$ et situés principalement en atome V.

Le moment total des alliages half-Heusler half-métallique peut être estimée par la règle $\mu_{tot} = Z_t - 18$; étant donnée que Z_t est le nombre totale d'électrons de valence, sa valeur est la somme du nombre des électrons de spin-up et de spin-

down $Z_t = N^\uparrow + N^\downarrow$, tandis que le moment total μ_{tot} est la différence $\mu_{tot} = N^\uparrow - N^\downarrow$. Depuis 9 bandes minoritaires de l'alliage half-Heusler sont entièrement occupés, nous obtenons la règle simple de 18 pour la semi-métallique dans la structure $C1_p$.

Les composés full-Heusler avec la structure $L2_1$ il y a 12 bandes minoritaires entièrement occupés, leurs moments totaux estimés par a regle $\mu_{tot} = Z_t - 24$ [28-34]. Le composé CoVTe est un half Heusler, il a 19 électrons de valence, 9 de Co, 5 de V, et 6 de Te. Le moment magnétique total calculé est en accord avec la règle de $\mu_{tot} = Z_t - 18$.

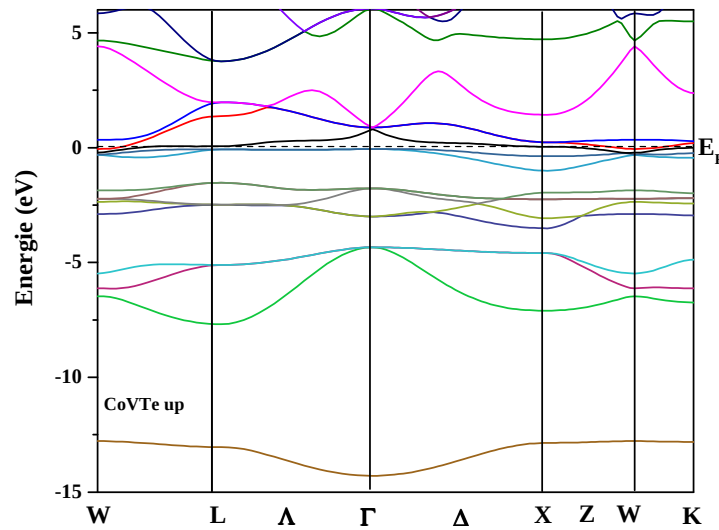


FIG. III.8. La structure de bande électronique pour les électrons de spin majoritaires dans CoVTe

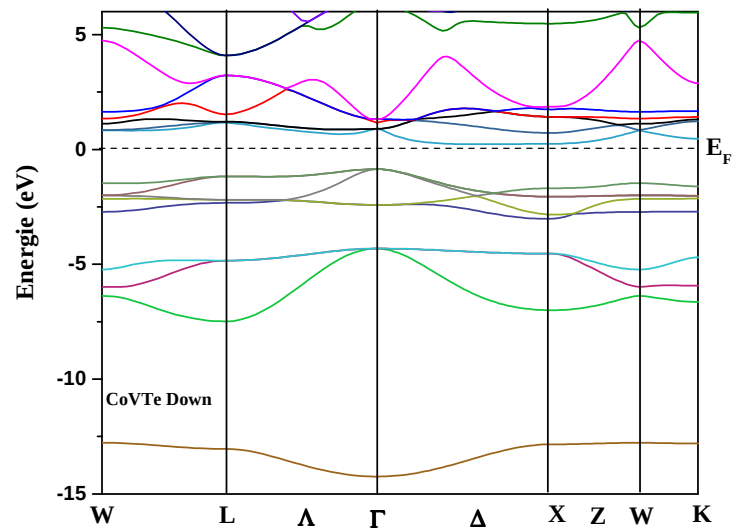


FIG. III.9. La structure de bande électronique pour les électrons de spin minoritaires dans CoVTe.

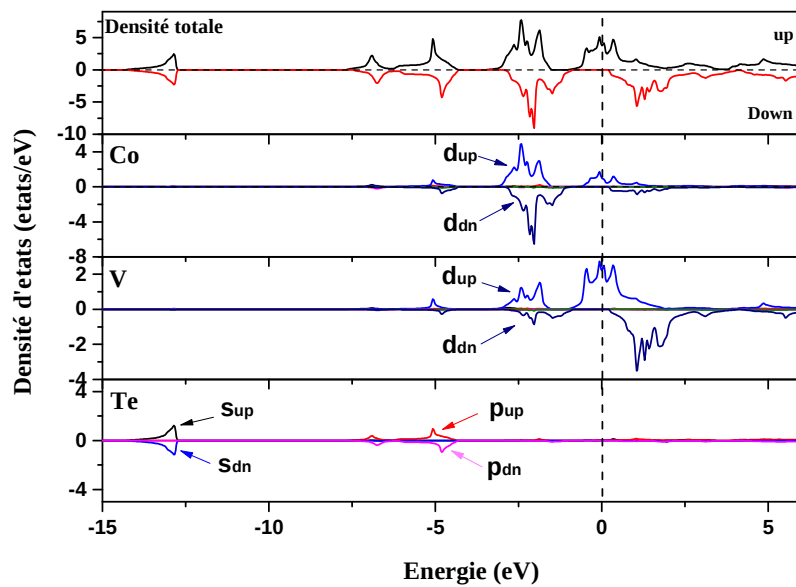


FIG. III.10. les densités d'états DOS partiel et total calculée pour le composé CoVTe

Pour vérifier la stabilité du caractère half-métallique et ferromagnétique c'est-à-dire le passage d'un half-métal à un métal pur du composé CoVTe, nous avons étudié la variation du gap half-métallique en fonction du paramètre de maille dans l'intervalle $[-2, +4\%]$, on a remarqué que le composé CoVTe préserve son comportement half-métallique dans cet intervalle. Ce qui indique que le composé CoVTe est plus stable que les composés NiMnSb [28], où la moindre délitation ou contraction détruit cette nature. On peut conclure que le composé CoVTe est un matériau half-métallique ferromagnétique stable, qui peut être utilisé dans la technologie spintronique.

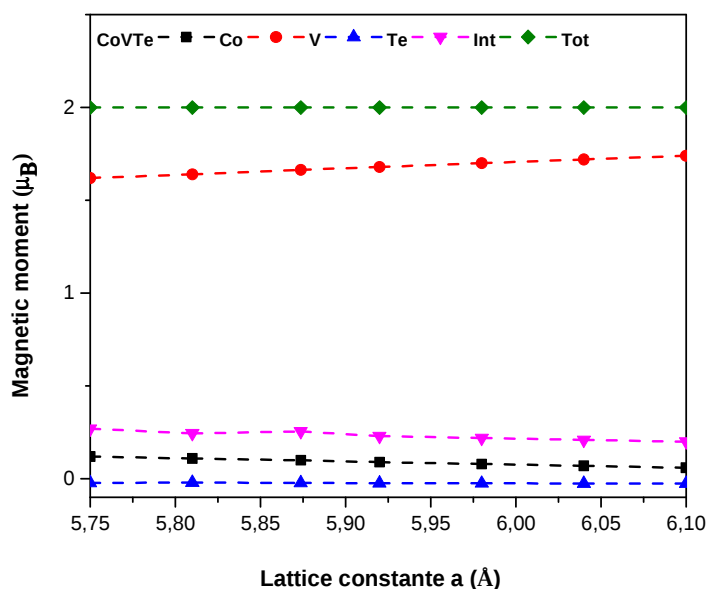


FIG. III.11. La variation des moments magnétiques en fonction du paramètre de maille dans l'intervalle $[-2\%, +4\%]$.

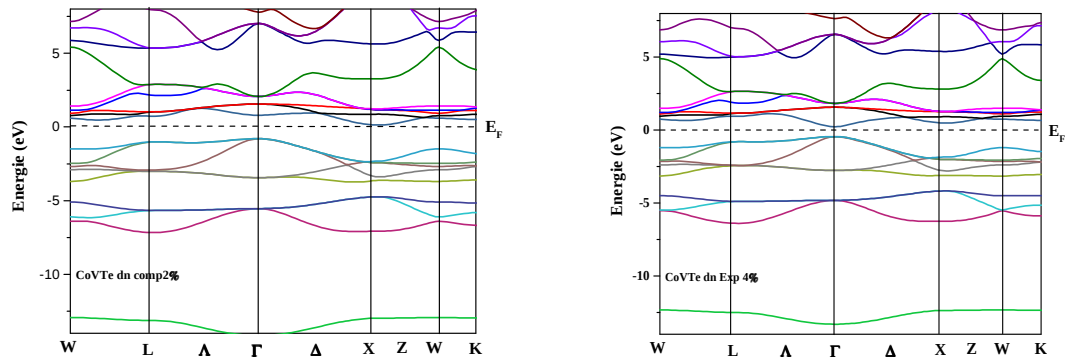


FIG. III.12. La structure de bande électronique pour les électrons de spin minoritaires du composé CoVTe pour une dilatation de 4 % et une compression de 2 %.

III .7.3. Les propriétés mécaniques :

Les constantes élastiques interprètent la relation entre le comportement dynamique et mécanique du solide, et donnent des informations sur la nature des forces intervenant dans le solide et apportent une indication sur la stabilité et la rigidité des matériaux. Les constantes élastiques C_{ij} sont calculées par la méthode “stress–strain” [24].

Puisque CoVTe est cubique nous avons utilisé les critères de Born pour vérifier la stabilité de la structure. Les paramètres élastiques qui dérivent des constantes élastiques sont donnés par [29]:

$$B_V = B_R = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (1)$$

$$G_R = 5(C_{11} - C_{12})C_{44}/(4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})) \quad (2)$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \quad (3)$$

$$B = (1/2)(B_R + B_V) \text{ and } G = (1/2)(G_R + G_V) \quad (4)$$

$$\nu = (3B - 2G)/[2(3B + G)], E=9BG/(3B + G) \quad (5)$$

$$A=2C_{44}/(C_{11}-C_{12}) \quad (6)$$

Puisque notre composé est cubique, Les critères de Born utilisés pour vérifier la stabilité de la structure sont :

$$(C_{11}+2C_{12})/3>0, C_{44}>0, (C_{11}-C_{12})/2>0 \text{ and } C_{12}<B<C_{11} \quad (7)$$

Les constantes élastiques calculées du composé CoVTe de structure $C1_b$ sont données dans le tableau 3. Les résultats montrent que ce composé est mécaniquement stable.

Le module Young E donne des informations sur la rigidité du matériau. Le solide est rigide lorsque la valeur de ce module est élevée. La valeur estimée de ce module pour le composé CoVTe est 115.7364 GPa. Ce qui indique que ce composé est moins rigide que le composé RuVTe avec un module de Yong E égal a 156.82.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	G
CoVTe	156.4631	100.3381	57.8040	119.047	43.2510

Tableau 3: les valeurs estimées des constantes élastiques C_{ij} (GPa), B (GPa), G (GPa), B/G, A, E et ν .

	B/G	ν	E	A
CoVTe	2.75	0.33	115.7364	2.0598

Tableau 4: les valeurs estimées des paramètres élastiques B/G, A, E et ν .

Le coefficient de Poisson ν qui renseigne sur la fragilité d'un matériau donné, est généralement égal à $1/3$ pour les matériaux ductiles et inférieur à cette valeur pour les matériaux fragiles (brittle materials). Pour notre composé le coefficient de Poisson ν est égal à 0.33 ce qui indique qu'il est ductile.

D'autre part, afin d'examiner la ductilité et la fragilité d'un matériau, Pugh [25,26] pose une relation empirique où le rapport B/G entre les modules de compression et de cisaillement est un indicateur du comportement plastique du matériau. Ainsi si $(B/G > 1.75)$ le matériau est ductile sinon si $(B/G < 1.75)$ le matériau est dur est fragile. Pour le composé CoVTe le rapport $B/G = 2.75 > 1.75$ ce qui confirme la nature fragile de ce composé.

Par ailleurs, Nguyen-Manh et al. [27], fournissent une interprétation de la pression de Cauchy ; si la tension provient principalement des liaisons chimiques alors la pression de Cauchy est positive. Dans le cas contraire ça signifie qu'en plus du potentiel des liaisons il y a un autre potentiel qui dépend de l'environnement qui est répulsif, qui l'emporte. Étant donné que la pression de Cauchy calculée pour le CoVTe est positive alors les liaisons dominantes sont des ioniques. Enfin, le rapport B/C_{44} renseigne sur la plasticité [28]. Une grande valeur de B/C_{44} indique que le matériau possède d'excellentes propriétés de lubrification. Dans notre cas $B/C_{44} = 2.04$ est nettement supérieur à celui du composé RuVTe ($B/C_{44} = 0.98$). On peut conclure que CoVTe est plus élastique que RuVTe.

III .7.4. Propriétés thermodynamiques :

Les paramètres thermodynamiques sont calculés par le modèle quasi-harmonique de Debye. La capacité calorifique a volume constant C_v et a pression constante C_p , la température de Debye Θ , le coefficient de dilatation thermique α le paramètre de Grüneisen γ dans l'intervalle de temperature [0K, 1000K] d'un pas de 100K et dans un intervalle de pression [0GPa, 40GPa] d'un pas de 20 GPa.

Les capacités spécifiques C_v et C_p sont des paramètres très importants qui lient la thermodynamique, la dynamique et la structure microscopique.

Il est clair a partir des figures 13 et 14 que pour les températures inférieures à 650K, les variations de C_v et C_p sont très liées à la température à cause de l'approximation anharmonique utilisée dans les calculs ; par contre à hautes température C_v prend une valeur constante ($\approx 75 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$) obéissant à la règle de Dulong et Petit qui gère le comportement de tout les solide a hautes température [29, 30]. Alors que C_v et C_p décroît en fonction de la pression.

Plusieurs propriétés physiques sont liées directement à la température de Debye, il est trouvé que Θ croît lorsque la pression augmente par contre paramètre de Grüneisen γ décroît lorsque la température est constante cependant, quand la pression est constante la température de Debye Θ décroît et le paramètre de Grüneisen γ croît lorsque la température augmente. les figures 15 et 16 regroupent les variations de la température de Debye Θ et du paramètre de Grüneisen γ .

Il est noté dans la Figure 17 que la relation entre le module d'incompressibilité et la pression est quasi linéaire. Le module d'incompressibilité augmente avec la pression et diminue avec la température.

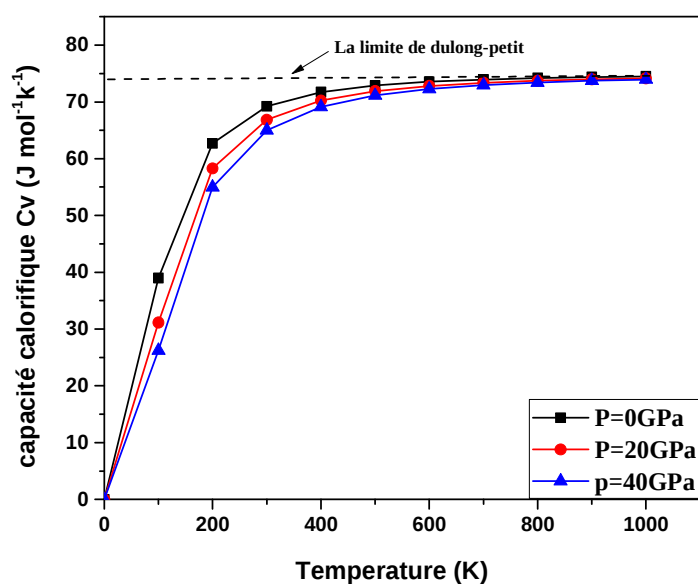


FIG. III.13. Les variations de C_v en fonction de la température pour différentes valeurs de pressions.

Le coefficient de dilatation thermique α a été prédit (figure 18). Il croît rapidement en puissance cube de la température puis tend vers une limite. Nous constatons, pour une pression donnée α augmente avec la température quand $T \leq 400\text{K}$ (à basse température), particulièrement à pression nulle, et tend progressivement à augmenter linéairement à des températures plus élevées. Quand la pression augmente, la variation de α avec la température devient plus petite.

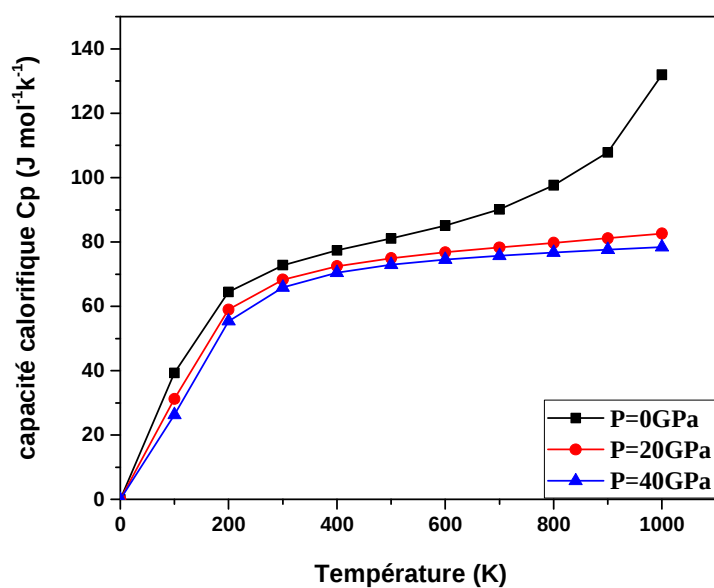


FIG. III.14. les variations de CP en fonction de la température pour différentes valeurs de pressions.

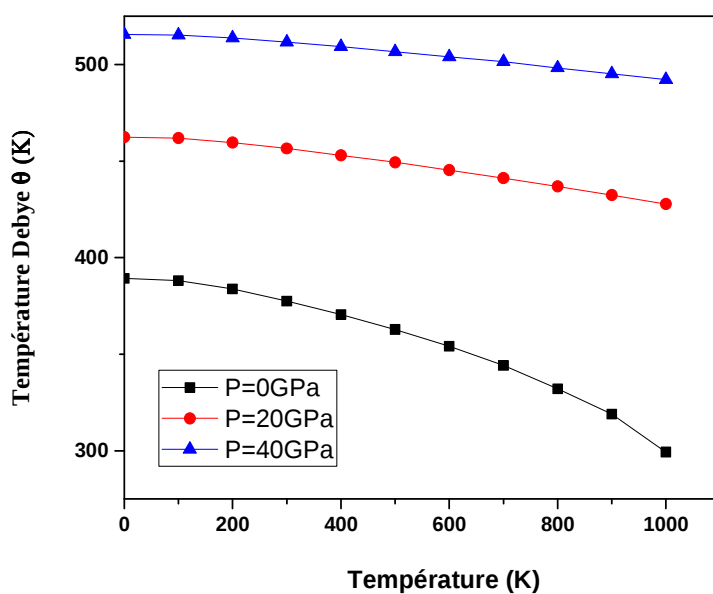


FIG. III.15. Variations de la température de Debye θ en fonction de la température pour différentes pressions.

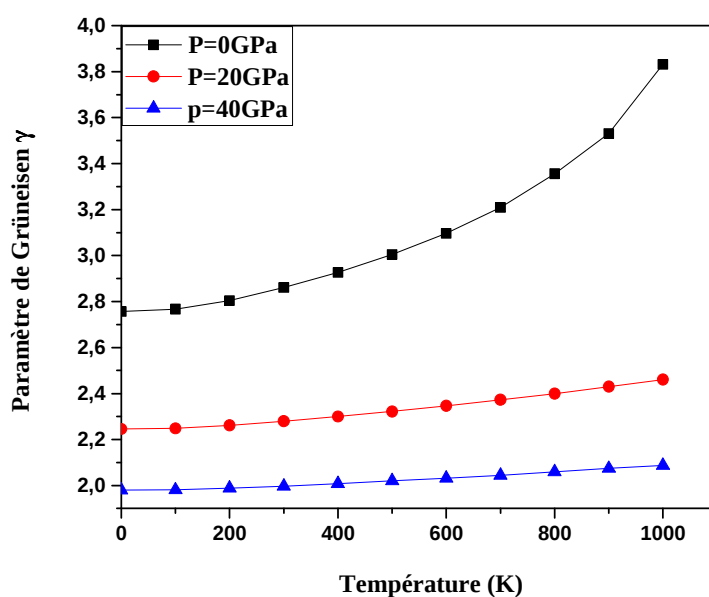


FIG. III 16. Variations du paramètre de Grüneisen en fonction de la température pour différentes pressions.

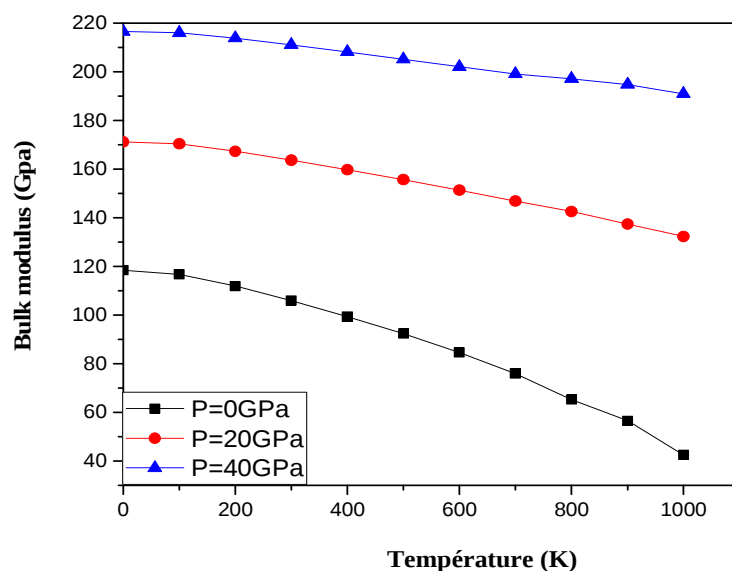


FIG. III. 17. Variations du module d'incompressibilité en fonction de la température pour différentes pressions.

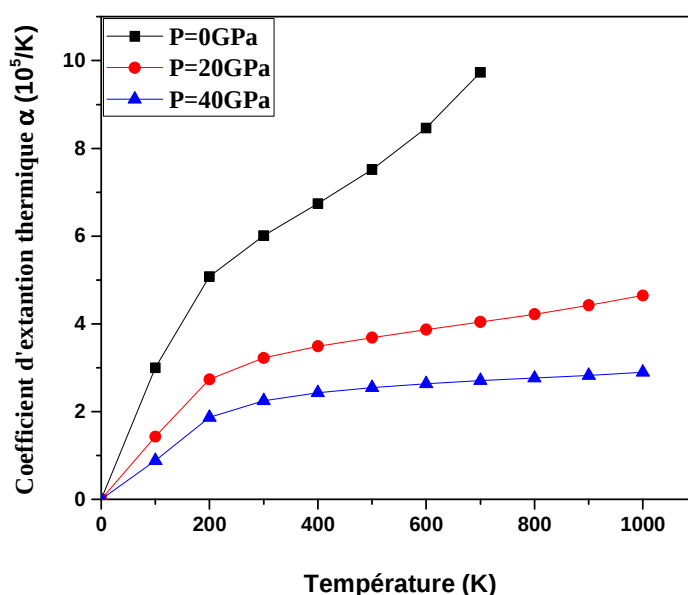


FIG. III. 18. Variations du coefficient de dilatation thermique en fonction de la température pour différentes pressions.

Pour une température donnée, α décroît fortement avec l'augmentation de la pression, et elle est très faible à des températures plus élevées et à des pressions plus élevées aussi.

III.8. Conclusion :

L'investigation du composé half-Heusler CoVTe par la méthode FP-LAPW a montrée qu'il est ferromagnétique half-métallique, il a un caractère métallique pour les bandes de spin majoritaire (up) et il se comporte comme un semi-conducteur pour les bandes de spin minoritaire (Down). L'écart provient de la forte hybridation entre les états (d) de l'atome V et l'atome Co.

L'élément sp (Te) est très important pour les propriétés physiques des alliages Half-Heusler il assure la stabilité de la structure Cl_p . Le moment magnétique total μ_{tot} calculé est $2\mu_B$, il est situé principalement en atome V. Le moment magnétique total μ_{tot} calculé est en accord avec la règle de $\mu_{tot} = Z_t - 18$. L'étude de la variation du gap half-métallique et les moments magnétiques en fonction du paramètre de maille dans l'intervalle $[-2, +4\%]$ prouve que notre composé préserve son caractère ferromagnétique et half-métallique dans ce domaine.

L'étude des propriétés mécaniques révèle que le composé est mécaniquement stable, dure et que les liaisons ioniques dominent. Ce travail nous permet de conclure que le composé CoVTe est un bon candidat pour la technologie spintronique.

Finalement, les propriétés thermiques telles que les capacités spécifiques C_v et C_p , la température de Debye, le paramètre de Grüneisen, le module d'incompressibilité, le coefficient de dilatation thermique sont étudiées pour la première fois en utilisant le modèle de Debye. Il est remarquable que les variations sont en bon accord avec la théorie de Debye appliquée à la plupart des matériaux.

III.9. Perspective :

L'étude des propriétés optiques et thermoélectriques peuvent nous permettre de déterminer l'aptitude de ce matériau d'être utilisé en technologie optoélectronique.

Références bibliographiques :

- [1] F. Heusler, Verh. Dtsch. Phys. Ges. 5, (1903) 219.
- [2] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen and K. H. J. Buschow, Appl. Phys. 55, (1984) 2151. [3] I. Galanakis and P. H. Dederichs, J. Phys. : Condens. Matter 676, (2005) 1.
- [4] K. Endo, T. Phayama and R. Kitamura J. Phys. Soc. Jpn. 19, (1964) 1494.
- [5] J. Kubler, Physica B 127, (1984) 257.
- [6] R. Dunlap, G. Stroink and K. Dini, J. Phys. F. Met. Phys. 16, (1986) 1083.
- [7] W. Zukovski, A. Andrejezuk, L. Dobrzyeski, M. J. Cooper, M. A. G. Dixon, S. Gardelis, P. K. Lawson, T. Buslaps, S. Kaprzyk, K. U. Neumann and K. R. Ziebeck, J. Phys.: condens. Matter 9, (1997) 10993.
- [8] J. Worgull, E. Petit and J. Trivisonno, Phys. Rev. B 54, (1996) 15695.
- [9] S. Plogmann, T. Schlatholter, J. Braun and M. Neumann, Phys. Rev. B 60, (1999) 6428.
- [10] S. Ishada, J. Ishada, S. Asano and J. Yamashita, J. Phys. Soc. Jpn. 45, (1978) 1239.
- [11] J. Kubler, A. R. Williams and C. B. Sommers, Phys. Rev. B 28, (1983) 1745.
- [12] S. Fujii, S. Ishida and S. Asano, J. Phys. Soc. Jpn. 58, (1989) 3657.
- [13] P. J. Webster and K. R. A. Ziebeck, J. Phys. Chem. Solids. 34, (1973) 1647.

- [14] A. A. Aquela, J. Enkovaara, K. Uliakko and R. E. Nieminen, J. Phys.: Condens. Matter 11, (1999) 2017.
- [15] A. Deb and Y. Sakurai, J. Phys.: Condens. Matter 12, (2000) 2997.
- [16] K. Kakeshita and K. Ullakko, MRS Bulletin 27, (2002) 105.
- [17] R. Mullner, V. A. Chermenko and G. Kostorz, Ser. Mater. 49, (2003) 129.
- [18] V. A. Chernenko, V. A. L'vov, R. Mullner, G. Kostorz and T. Takagi, Phys. Rev. B 69, (2004) 134410.
- [19] S. E. Kulkova, S. V. Ereemeev and S. S. Kulkov, Solid State commun. 130, (2004) 793. pg. 49 Références chapitre III
- [20] S. E. Kulkova, S. V. Ereemeev, T. Kakeshita, S. S. Kulkov and G. E. Rudenski, Materials Transactions 47, (2006) 599.
- [21] R. A. de Groot, A. M. van der Kraan and K. H. J. Buschow, J. Magn. Magn. Mater. 61, (1986) 330. [22] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin and S. B. Trickey, comput. Phys. Commun. 59, (1990) 399.
- [23] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, (1996) 3865.
- [24] M. A. Blonco, E. Francisco and V. Luaña, Comput. Phys. Commun. 158, (2004) 57.
- [25] M. A. Blonco, A. M. Pendás, E. Francisco, J. M. Recio and R. Franco, J. Mol. Struct.Theochem. 368, (1996)245.
- [26] E. Francisco, M. A. Blonco and G. Sanjurjo, Phys. Rev. B 63, (2001) 049107.

- [27] O. Merabiha, T. Seddik, R. Khenata, G. Murtaza, A. Bouhemadou, Y. Takagiwa, S. Bin Omran and D. Rached, Journal of Alloys and Compounds 586, (2014) 529.
- [28] A. Bouhemadou, R Khenata and B. Amrani, Physica B 404, (2009) 3534.
- [29] F. Peng, H. Fu and X. Yang, Physica B 403, (2008) 2851.
- [30] K. Selçuk and K. Nazmiye, Intermetallics 46, (2014) 45.

ملخص:

ان العمل المعروض في المذكرة قد تم باستعمال نظرية الكثافة الوظيفية DF . أجريت الحسابات على أساس مقارنة الكمون التام للموجات الخطية المتزايدة ($FP-LAPW$) بتقريب معمم التدرج (GGA) في إطار نظرية باري، بارك و ارنزرهف (PBE) باعتبارها بالأخص علاقة تبادل وظيفية أكثر من كونها جزء من حساب الطاقة الكلية. قد تمت دراسة الخواص البنيوية، الالكترونية المغناطيسية للمركب النصف-هاسلر $CoVTe$ من خلال التحليل البنيوي للأشرطة الطاقوية و كثافة المستويات المحسوبة من اجل المركب لوحظ تهجين قوي بين الحالات (د) للذرات ذات التكافؤ العالي (Co) و الحالات (د) للذرات ذات التكافؤ المنخفض (V) للمعادن الانتقالية TM . من خلال دراسة كثافة المستويات العامة و الجزئية (DOS) و العزم المغناطيسي تبين أن هذا المركب هو نصف-معدن ممغنط مستقر. كما أن تأثير حجم الخلية الأساسية على الخواص نصف-معدنية و المغناطيسية كبير. انه لمن المهم الإشارة إلى أن نتائجنا في ما يخص العزم المغناطيسي الكلي للمركب $CoVTe$ يساوي $2 \mu_B$ تخضع للقاعدة $\mu_{tot} = Z_t - 18$. ان دراسة الخواص الميكانيكية بينت ان المركب مستقر لين و ان الروابط المعدنية هي المسيطرة. و اخيرا تمت دراسة الخواص الترموديناميكية مثل السعات C_p و C_v ، درجة حرارة دوباي، معامل غرنشن، معامل الانضغاط و معامل التمدد الحراري لأول مرة.

Résumé :

Le travail de ce mémoire est basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT réalisés via FP-LAPW computationnelle approches dans le cadre de l'approximation des gradients généralisée GGA paramétrée par Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) et implémenté comme une corrélation et échange fonctionnelle autant qu'une partie de calcul de l'énergie total. L'objectif était l'étude des caractéristiques structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques de l'alliage half-Heusler $CoVTe$. L'investigation de la structure des bandes d'énergies et des densités d'états montre une forte hybridation entre les états d des atomes des métaux de transition de forte valence (Co) et les états d des atomes du métal de transition de faible valence (V), ce qui engendre un gap half-métallique. L'étude des densités d'états totales et partielles (DOS) et les résultats des moments magnétiques de spin révèlent que ce composé est à la fois stable et half-métallique ferromagnétique idéal. Les effets du volume de la maille élémentaire sur les propriétés half-métalliques et magnétiques sont importants. Il est intéressant de noter que nos résultats du moment magnétique total pour l'alliage $CoVTe$ égale à $2 \mu_B$ par maille élémentaire, obéit à la règle $\mu_{tot} = Z_t - 18$. La prédiction des propriétés mécanique révèle que le composé est mécaniquement stable, dure et ductile et que les liaisons métalliques dominant. Finalement, les propriétés thermiques tel que les capacités spécifiques C_v et C_p , la température de Debye, le paramètre de Grüneisen, le module d'incompressibilité, le coefficient de dilatation thermique sont étudiées pour la première fois on utilisant le modèle de Debye.

Abstract:

Our work is based on the First-principles spin polarized density functional theory (DFT). The calculations are accomplished within the state of the art full-potential (FP) linearized (L) augmented plane wave (APW) computational approach framed within DFT. Generalized gradient approximation (GGA) parameterized by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) is implemented as an exchange correlation functional as a part of total energy calculation. The aim of our study is to predict the structural, electronic, magnetic and thermodynamics characteristics of the half-Heusler, $CoVTe$ compound. From the analysis of calculated electronic band structure as well as density of states for both compounds, a strong hybridization between d states of the higher valent transition metal (TM) atoms (Co) and lower valent TM atoms of (V) is observed. Furthermore total and partial density of states (DOS) of ground state and the results of spin magnetic moments reveal that this compound is both stable and ideal half-metallic ferromagnetic. The effects of the unit cell volume on magnetic properties and half-metallicity are crucial. It is worth noting that our calculated result of total spin magnetic moment, for $CoVTe$ equal to $2 \mu_B$ per unit cell, nicely follow the rule $\mu_{tot} = Z_t - 18$. The investigation of the mechanical properties reveals that the compound is mechanically stable, hard and ductile and that metallic bonds dominate. Finally, the thermodynamic properties such as the specific capacities C_v and C_p , the Debye temperature, the Grüneisen parameter, the bulk modulus, the coefficient of thermal expansion are studied for the first time using the Debye model.