



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN**

# MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

DIVISION ETUDE ET PREDICTION DES MATERIAUX  
UNITE DE RECHERCHE MATERIAUX ET ENERGIES RENOUVELABLES

Pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER EN PHYSIQUE**

Spécialité : Physique de la matière condensée

Par :

**BEKKOUCHE Sabrine**

Sur le thème

---

## **Etude et prédiction des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages semi- Heusler RhYAs (Y= Cr, Ti, V, Mn)**

---

Soutenu publiquement le 07 juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr. BABA AHMED Nassim	MCA	Université de Tlemcen	Président
Mr. BENABADJI Mostafa Kerim	MCA	Ecole ESGEE - CPST - Oran	Examineur
Mme SI ABDELKADER Hayet	MCA	C.U. Maghnia - Tlemcen	Encadreur

*Année Universitaire : 2020 ~ 2021*

## **Remerciements**

*Tout d'abord, louange à Allah pour tous ses bienfaits innombrables*

*Ce travail est réalisé au sein de la Division Etude et Prédiction des Matériaux (DEPM) affiliée à l'Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables (URMER) de l'Université de Tlemcen.*

*En premier lieu, je remercie chaleureusement Madame Si Abdelkader Hayet pour sa patience, sa disponibilité et pour le soutien d'accompagnement qu'elle m'a accordé. Aussi pour ses encouragements, ses orientations et ses conseils.*

*Je tiens à adresser mes vifs remerciements à Mr. Baba Ahmed Nassim pour l'honneur d'avoir accepté de présider le jury.*

*Je tiens à remercier, également, Mr. Benabadji Mostafa Kerim pour l'honneur d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

*Mes remerciements vont particulièrement à Monsieur le Chef de département de physiques et le Doyen de la faculté des sciences, chacun à son nom.*

*Enfin, Je remercie tous les membres de ma famille pour leur soutien et leurs encouragements particulièrement, ma mère, mes sœurs et frères.*

## ***Dédicace***

*Louange à Dieu tout puissant, qui m'a permis de voir ce jour tant attendu*

### ***A la mémoire de mon père***

*Grâce à toi papa j'ai appris le sens du travail et de la responsabilité. Je voudrais te remercier pour ton amour, ta générosité, ta compréhension... Ton soutien fut une lumière dans tout mon parcours. Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour l'estime et le respect que j'ai toujours eu pour toi.*

### ***A ma chère mère***

### ***A mes frères et sœurs***

### ***A mon fiancé***

### ***A toute ma famille***

### ***A mes camarades***

### ***A tous ceux que j'aime***

### ***A mes enseignants***

# *Table des matières*

Introduction générale .....	1
Chapitre I: Généralités sur la spintronique	
I.1. Introduction.....	5
I.2. La magnétorésistance .....	5
I.2.1. La magnétorésistance géante (GMR) .....	5
I.2.2. Magnétorésistance tunnel (TMR).....	8
I.3. Les applications de la spintronique .....	8
I.4. Les matériaux utilisés dans les dispositifs spintronique .....	10
I.5. Les différentes formes du magnétisme .....	11
I.5.1. Diamagnétisme .....	11
I.5.2. Paramagnétisme.....	11
I.5.3. Ferromagnétisme .....	12
I.5.4. Antiferromagnétisme .....	13
I.5.5. Ferrimagnétisme .....	13
Références.....	15
Chapitre II : Généralités sur les alliages Heusler et semi-Heusler	
II.1. Introduction .....	16
II.2. Alliages Heusler (Full-Heusler).....	17
II.2.1. Structure cristalline.....	17
II.2.2. Composés Heusler quaternaires .....	18
II.3. Les alliages Semi-Heusler (Half-Heusler).....	19
II.3.1. Structure cristalline.....	19
II.4. Le Magnétisme et les alliages Heusler .....	20
Références.....	22
Chapitre III : Résultats et discussions	
III.1. Introduction .....	23
III.2. Méthode de calcul.....	23
III.2.1. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) .....	23
III.2.1.1. L'équation de Schrödinger .....	23
III. 2.1.2. Théorème de Hohenberg et Kohn .....	24
III.2.1.3. Les équations de Kohn-Sham .....	24

III.2.1.4. Les approximations d'échange-corrélation.....	25
III.2.2 La méthodes des pseudo-potentiels et ondes planes .....	26
III.2.3 Détails de calcul.....	26
III.3 Structure cristalline des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn) .....	27
III.4. Test de convergence.....	28
III.4.1. Choix du nombre de K-points.....	28
III.4.2. Choix de l'énergie de coupure .....	29
III.5. Propriétés structurales .....	29
III.6. Propriétés électroniques .....	32
III.7. Propriétés magnétiques .....	34
III.8. Propriétés mécaniques.....	36
III.8.1. Les constants élastiques.....	36
III.8.2. Les modules de compression, de Young, de cisaillement et le facteur d'anisotropie.....	37
Références .....	40
Conclusion générale .....	42



***INTRODUCTION***  
***GÉNÉRALE***

La physique du solide est l'étude des propriétés fondamentales des matériaux solides, elle est considérée comme une branche riche et diverse et une partie indissociable du développement technologique et industriel. Il y a un grand nombre de matériaux avec des propriétés et des comportements différents selon la nature et les conditions. Une classe très importante connue sous le nom d'alliage Heusler, c'est une catégorie des alliages comprend de plus de 1000 composés. Cette classe a attiré l'attention ces dernières années en raison de leurs propriétés intéressantes et leurs applications pratiques comme la magnéto-électronique et la spintronique.

Les alliages Heusler sont une catégorie particulière de composés intermétalliques nommés d'après Friedrich Heusler, qui en 1903, a rapporté que le  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  est un matériau ferromagnétique alors que ses constituants élémentaires ne sont pas ferromagnétiques. Depuis la prédiction de la semi-métallicité, par Groot et al. en 1983, de l'alliage  $\text{NiMnSb}$ , l'intérêt scientifique des alliages Heusler a été renouvelé et ces matériaux ont commencé à susciter des intérêts à la fois théorique et expérimental considérables. En plus de  $\text{NiMnSb}$ , plusieurs autres alliages Heusler ont été prédits, par des calculs ab-initio, comme des semi-métaux (100% de taux de polarisation en spin), tels que les alliages Heusler à base de Co, qui sont considérés comme des candidats prometteurs pour les applications de spintronique commerciaux, en raison notamment de leurs hautes températures de Curie [1].

Les alliages Heusler sont divisés en deux types. Le 1<sup>er</sup> type est les alliages full-Heusler qui ont la formule générale  $X_2YZ$ , ils cristallisent dans une structure cubique ( $L2_1$ ), où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément du groupe III, IV ou V dans le tableau périodique. Le 2<sup>ème</sup> type est les alliages half-Heusler qui ont la forme générale  $XYZ$ , ils cristallisent dans une structure cubique ( $C1_b$ ), qui se compose de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés occupés par les trois atomes X, Y et Z et un site vacant. Typiquement, Y et Z sont les métaux alcalins, des métaux de transition ou des terres rares, et X est un élément du groupe principal.

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une des méthodes quantiques les plus couramment employées dans les domaines de la physique du solide et de la chimie quantique pour la détermination des grandeurs physiques et quantiques d'un système (et particulièrement les systèmes contenant un grand nombre d'électrons), telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation ... etc. C'est une méthode di

te de premier principe. En effet, elle repose sur les fondements de la mécanique quantique et ne fait intervenir qu'un nombre limité de données d'entrées. Pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger sans l'introduction de paramètres ajustés par l'expérience [2].

Dans ce travail, nous présentons une étude systématique des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et mécaniques des composés RhYAs (Y= Ti, V, Cr, Mn), en se basant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Ce mémoire est structuré comme suit :

- Le premier chapitre est une brève présentation sur la spintronique, les applications de la spintronique, les matériaux utilisés dans les dispositifs spintronique, ainsi que les différentes formes du magnétisme
- Le deuxième chapitre présente les alliages Heusler (full-Heusler  $X_2YZ$  et half-Heusler  $XYZ$ ) et leurs structures.
- Le troisième chapitre est consacré aux résultats et discussions, où nous rappelons dans la première partie la méthode et le code de calcul utilisés dans ce travail. Dans la deuxième partie, nous présentons l'interprétation des résultats des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et mécaniques des quatre composés RhYAs (Y= Ti, V, Cr, Mn) étudiés.

Enfin, nous allons terminer ce travail par une conclusion générale qui résume l'essentiel des résultats obtenus.

## Référence

[1] H. Tuzcuoglu. Corrélation entre les propriétés structurales et magnétiques des couches minces et nanostructures de  $\text{Co}_2\text{FeAl}$ . Physique [physics]. Université Paris 13, 2014. Français.

[2] S. Lardjane. Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du semiconducteur magnétique dilué : ZnO dopé au Cobalt. Autre. Université de Technologie de Belfort-Montbéliard; Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen, 2013.

# **CHAPITRE I :**

## ***Généralités sur la spintronique***

## I.1. Introduction

Le terme spintronique (L'électronique de spin), conçu en 1996 et devenu très populaire dans le domaine de la recherche de matériaux pour les dispositifs électroniques. Il fait référence à l'intégration du spin de l'électron, en plus de sa charge électronique, dans les semi-conducteurs pour une application technologique dans les nouveaux domaines émergents du filtrage de spin, du traitement numérique des données et du stockage d'informations [1]. Les premières structures étudiées dans le domaine de la spintronique sont constituées de multicouches métalliques ferromagnétiques.

La spintronique est née en 1988, année de découverte de la magnétorésistance géante (GMR) par les équipes d'Albert Fert en France et de Peter Grünberg en Allemagne, qui ont eu le prix Nobel de physique en 2007 pour la découverte de la GMR qui est le point de départ de la spintronique. Cette découverte a été la première utilisation de la polarisation en spin des électrons dans le cadre de l'électronique, c'est à dire du transport de charge électrique.

Le concept général de la spintronique est de placer des matériaux ferromagnétiques sur le trajet des électrons et d'utiliser l'influence du spin sur la mobilité des électrons dans ces matériaux. Cette influence, d'abord suggérée par Mott [2] en 1936, a été ensuite démontrée expérimentalement et décrite théoriquement à la fin des années 60 [3, 4].

## I.2. La magnétorésistance

### I.2.1. La magnétorésistance géante (GMR)

La magnétorésistance géante (MRG en français et GMR en anglais pour *Giant MagnetoResistance*) est un premier exemple de l'effet de la spintronique. Elle a été découverte en 1988 par l'équipe du Pr. Albert Fert en France et Pr. Peter Grünberg Pr. Fert en Allemagne, sur des multicouches (métalliques, ferromagnétiques et non magnétiques), par exemple un empilement alterné de couches ultrafines de fer et de chrome (Fe/Cr). 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 (Figure I.1.a) et antiparallèle (Figure I.1.b) séparées par une couche conductrice non-magnétique. 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 travers la structure presque sans diffusion (flèche verte), tandis que les électrons de spin minoritaire ( $e^{\text{down}}$ ) 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 [5].

En absence du champ magnétique extérieur, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques successives sont opposés et la résistance est maximale. Dans le cas de la présence d'un champ magnétique, les axes d'aimantation des couches ferromagnétiques s'alignent progressivement dans l'axe du champ magnétique appliqué et la résistance électrique de la structure diminue.

Dans ce phénomène, on peut écrire la résistance équivalente de ce système dans des orientations parallèle ( $R_P$ ) et antiparallèle ( $R_{AP}$ ) :

$$R_P = \frac{2Rr}{R+r} \quad (\text{I.1})$$

$$R_{AP} = \frac{R+r}{2} \quad (\text{I.2})$$

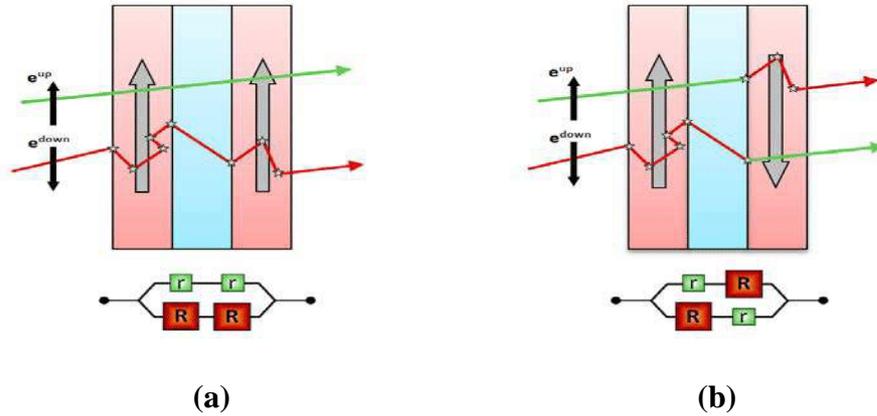
$r$  : Résistance des électrons où le spin est orienté avec l'aimantation de la couche.

$R$  : Résistance des électrons de spin opposé ( $R > r$ ).

La résistance de la couche non magnétique est négligée.

On constate que  $R_P < R_{AP}$  et que ces deux états de résistivité correspondent à une configuration magnétique différente. Cette différence peut alors être traduite sous la forme d'un écart relatif entre les deux valeurs de résistance (l'équation I.3). Cette différence est appelée Magnétorésistance Géante (GMR).

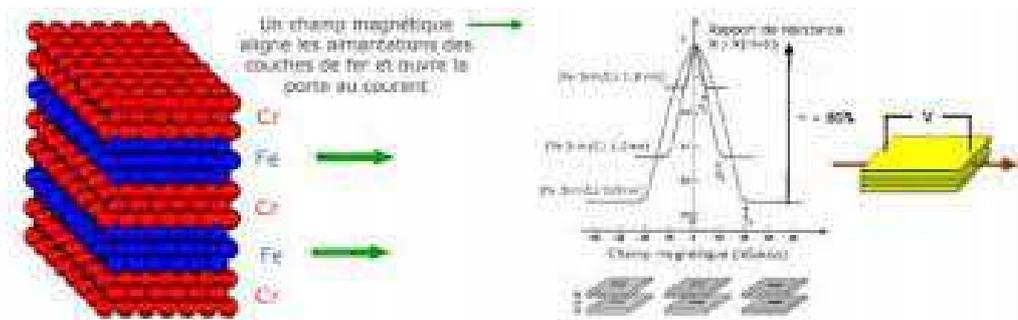
$$\text{GMR} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} \quad (\text{I.3})$$



**Figure I.1-** Principe de fonctionnement de la magnétorésistance géante (a) Magnétisation parallèle et (b) Magnétisation antiparallèle.

La Figure I.2 est un exemple typique du résultat expérimental de la magnétorésistance géante sur des multicouches Fe/Cr, empilements alternés de couches de fer et de chrome ultrafines. L'épaisseur  $d$  des couches de Cr varie de 0,9nm à 1,8nm, correspond à trois couches d'atomes de Cr.

Dans ces multicouches, et pour certaines épaisseurs de Cr, les aimantations des couches voisines de Fe sont orientées dans des directions opposées par des interactions d'échange à travers le Cr [6].



**Figure I.2 -**Variation de la résistivité en fonction du champ magnétique pour des multicouches Fe/Cr

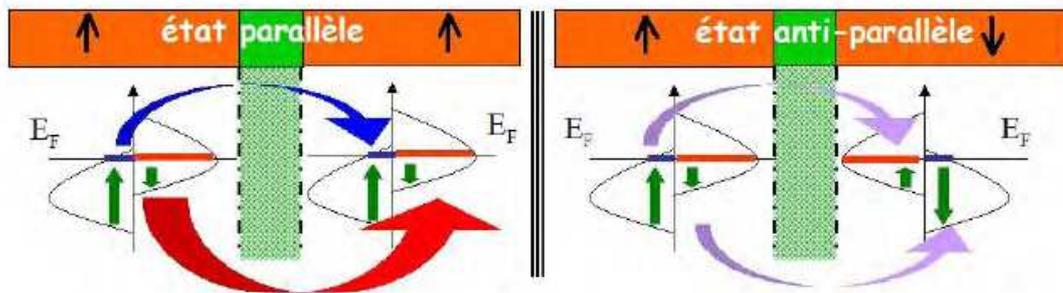
On peut cependant les aligner par application d'un champ magnétique. Le passage de la configuration antiparallèle (AP) à parallèle (P) s'accompagne d'une forte baisse de la résistance électrique de la multicouche magnétique et cette magnétorésistance a été appelée géante car elle est beaucoup plus grande que dans la plupart des conducteurs [6].

Des effets de la magnétorésistance géante ont été observés dans de très nombreux types de multicouches magnétiques et des valeurs de magnétorésistance supérieure à 200% ont été atteintes avec des multicouches Fe/Cr [6].

### I.2.2. Magnétorésistance tunnel (TMR)

L'effet de la magnétorésistance tunnel (TMR pour *Tunnel MagnetoResistance*), est très proche de la magnétorésistance géante. La TMR peut être observé dans les systèmes (Ferro/Isolant/Ferro) constitués de deux électrodes ferromagnétiques (couche libre et couche piégée) séparées par une fine couche isolante (appelée barrière tunnel) dont l'épaisseur est de l'ordre du nanomètre (Figure I.3). Cette couche constitue une barrière d'énergie pour les électrons de conduction. Ces électrons peuvent traverser la barrière par effet tunnel.

L'aimantation d'une des couches métalliques, dite couche de référence, est bloquée dans une direction fixe soit par couplage avec une couche fortement antiferromagnétique, soit du fait de son caractère magnétique plus dur (champ coercitif plus élevé). L'autre couche magnétique, dite libre, conserve la possibilité de changer son orientation selon celle du champ magnétique appliqué. Un changement de configuration des aimantations d'un état parallèle vers un état antiparallèle entraîne donc un changement de courant électrique à travers la barrière tunnel [7].



**Figure I.3-** Principe de la TMR pour une jonction tunnel magnétique(JTM).

### I.3. Les applications de la spintronique

L'application de la spintronique la plus utilisée industriellement est ce qu'on appelle une vanne de spin. C'est ce qui permet aux têtes de lecture des disques durs actuels (codant les 0 et

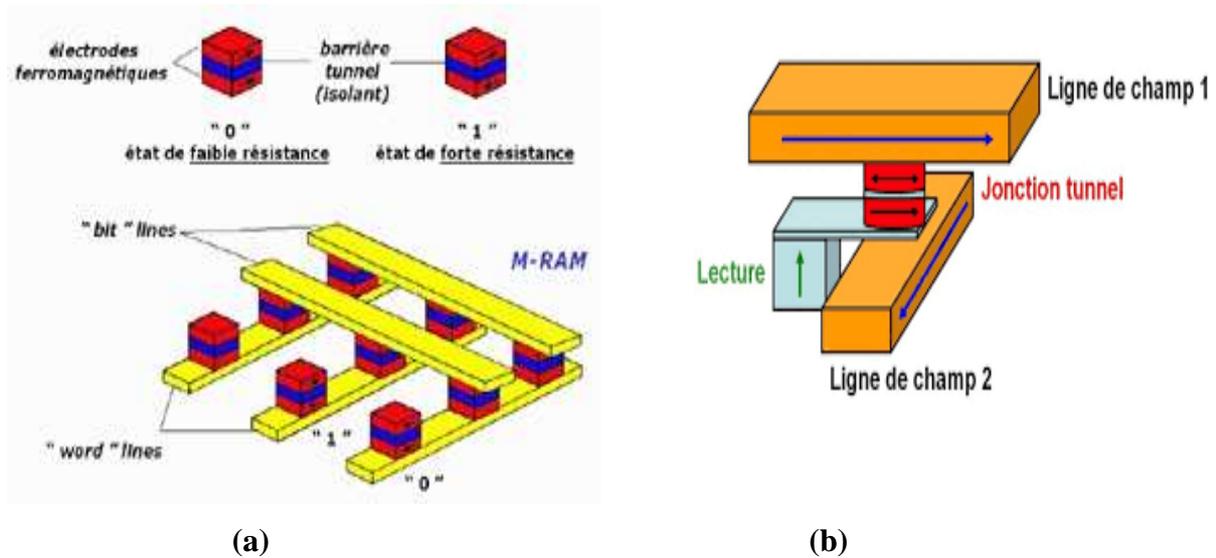
les 1) de la surface d'un disque dur. Une vanne de spin est typiquement formée par un empilement Ferro/Métal/Ferro où les matériaux ferromagnétiques sont les électrodes.

Cependant, d'autres applications sont d'ores et déjà en voie d'industrialisation par exemple la mémoire MRAM (pour *Magnetic Random Access Memory*). La mémoire MRAM est en développement depuis les années 1990, elle permet de stocker de l'information de manière non volatile grâce au même type d'empilement, mais en remplaçant la couche non magnétique par une couche d'isolant. On obtient alors une jonction tunnel magnétique dont l'état permet de stocker un bit d'informations.

Les jonctions tunnel magnétique (JTM) peuvent être utilisées comme éléments de stockage d'information binaires. En effet, il est possible d'obtenir une configuration parallèle ou antiparallèle des aimantations en champ nul qui conduit à deux états de résistance accessibles ceci permet alors d'enregistrer un état 0 ou un état 1 : État « 0 » correspond à la configuration parallèle (résistance faible) et état « 1 » correspond à la configuration antiparallèle (résistance forte).

La Figure I.4 représente l'architecture des MRAM, une jonction tunnel magnétique connectée en série avec un transistor de sélection, une ligne de bit et une ligne de mot.

L'écriture est effectuée en fermant le transistor et en faisant passer des courants à travers la ligne de bit et la ligne de mot qui se croisent au niveau du point mémoire adressé. On crée ainsi deux champs magnétiques orthogonaux au niveau de la jonction. Ces deux champs sont suffisants pour changer l'orientation de la couche libre. Chaque champ magnétique pris indépendamment ne permet pas le renversement de l'aimantation de la couche libre car le champ magnétique créé à l'intersection des deux courants doit être supérieur au champ coercitif de la couche libre [7].



**Figure I.4-** (a) Architecture d'une mémoire MRAM, (b) Schéma d'une cellule mémoire MRAM [8].

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 [7].

#### I.4. Les matériaux utilisés dans les dispositifs spintronique

- L'utilisation des matériaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques dans des dispositifs spintroniques tels que:
  - i. Les matériaux ferromagnétiques comme électrodes magnétiques aussi les métaux de transition 3d (Co, Fe, Ni), ou des alliages contenant des métaux 3d par exemple: CoFe, CoFeB, NiFe.
  - ii. Les matériaux antiferromagnétiques tels que CoFe, Ru, CoFe est aussi mise en avant car les effets spintroniques de ces matériaux ont été prévus théoriquement comme aussi importants que ceux des ferromagnétiques.
- La polarisation en spin des métaux 3d étant limitée, on utilise depuis quelques années de plus en plus d'oxydes magnétiques possédant une forte polarisation en spin tels que les manganites, dont le  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  (LSMO) qui possède une polarisation proche de 100%, des alliages de type Heuslers et semi-Heuslers ou encore les matériaux

multiferroïques magnétoélectriques (ME). Cette dernière famille contient entre autres le  $\text{BiFeO}_3$  (BFO),  $\text{BaTiO}_3$  (BTO),  $\text{PbTiO}_3$  (PTO),  $\text{Pb}(\text{ZrTi})\text{O}_3$  (PZT), et le  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  (LSMO).

- L'utilisation des semiconducteurs dans des dispositifs spintroniques est également de plus en plus étudiée. L'ingénierie des matériaux semiconducteurs permet un contrôle du gap entre la bande de valence et la bande de conduction et un contrôle du dopage. Les dispositifs basés sur ces matériaux peuvent être contrôlables par champ électrique ou par excitation optique.
- Les matériaux utilisés comme espaceur dépendent du type de jonction :
  - i. Pour les GMRs on utilise des métaux non magnétiques tels que Cu, Cr, Ru.
  - ii. Pour les TMRs on retrouve l'utilisation des composés  $\text{AlO}_x$  et de  $\text{TiO}_x$  comme barrières amorphes, ou  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$  et  $\text{MgO}$  comme barrières cristallines.

### I.5. Les différentes formes du magnétisme

Le magnétisme est un ensemble de phénomènes physiques dans lesquels les choses exercent des forces attractives ou répulsives sur d'autres matériaux. A l'état libre, un atome est magnétique s'il est porteur de moment magnétique permanent représenté par un vecteur de module constant. Tous les matériaux sont formés d'un ensemble d'atome qui peuvent être soit magnétique soit non magnétique.

Il existe cinq différentes formes de magnétisme :

#### I.5.1. Diamagnétisme

Dans ce cas, les matériaux magnétiques sont des substances qui n'ont pas de moments magnétiques en l'absence d'un champ magnétique appliqué.

Lorsqu'on applique un champ magnétique extérieur, ces matériaux acquièrent une polarisation magnétique dans la direction opposée à celle du champ appliqué.

Une autre explication suppose que l'origine de ce phénomène provient de la distorsion des orbites atomiques et elle peut être décrite par l'application de la loi de Lenz. Par conséquent, un tel matériau est caractérisé par une susceptibilité magnétique négative [9].

#### I.5.2. Paramagnétisme

Dans les solides paramagnétiques et en absence d'un champ magnétique externe, les atomes possèdent des moments magnétiques permanents, orientés aléatoirement et donnant

une aimantation nulle, qui est le moment magnétique par unité de volume. Lorsqu'on applique un champ magnétique externe, les moments s'orienteront suivant ce champ et il en résulte une aimantation non nulle, et donc une susceptibilité positive. Ce phénomène se rencontre dans les atomes, les molécules et les défauts cristallins possédant un nombre impair d'électrons, les atomes et les ions avec une couche interne incomplète : l'aluminium, le manganèse et le tungstène sont des exemples de matériaux paramagnétiques [10,11].

Le paramagnétisme est une propriété qui n'est pas intrinsèque à un matériau, mais c'est une réponse à l'application d'un champ magnétique. C'est un comportement qui dépend de la température, par exemple la matière perd son aimantation permanente au-dessus d'une certaine température critique appelée la température de Curie. La susceptibilité magnétique  $\chi_r$  de ces matériaux est comprise entre  $10^{-6}$  et  $10^{-3}$  et diminue avec la température  $T$  selon la loi de Curie [10,11]:

$$\chi_r = \frac{C}{T} \quad (\text{I.4})$$

$C$  : est une constante parfois appelée constante de Curie.

### I.5.3. Ferromagnétisme

Dans ce type de matériau, tous les moments magnétiques sont orientés parallèlement. Il existe alors une aimantation spontanée même en l'absence d'un champ magnétique appliqué. La plupart des solides ferromagnétiques sont des métaux tels que les métaux de transition (Fe, Co, Ni) et leurs alliages. Les éléments de transition sont les éléments de la classification périodique qui possèdent des orbitales  $d$  partiellement occupées par des électrons (Figure I.5). Le premier corps ferromagnétique connu est la magnétite (roche qui a la propriété d'attirer les métaux) [12,13].

s Elements										p Elements																																			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																												
H	He															He																													
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne																								
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar																								
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																												
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																												
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																												
Fr	Ra	Ac																																											
<b>f Elements</b>																																													
<table border="1"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Holm</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </table>																		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Holm	Er	Tm	Yb	Lu	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Holm	Er	Tm	Yb	Lu																																
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																
44,956	47,867	50,942	51,996	54,938	55,845	58,933	58,693	63,546	65,39																																				
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30																																				
88,906	91,224	92,906	95,94	98,906	101,07	102,91	106,42	107,87	112,41																																				
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48																																				
138,91	178,49	180,95	183,84	186,21	190,23	192,22	195,08	196,97	200,59																																				
57	72	73	74	75	76	77	78	79	80																																				

**Figure I.5-** Classification périodique des éléments, les orbitales d des éléments de transition sont à l'origine des propriétés magnétiques, électriques et optiques de ces éléments et de leurs composés.

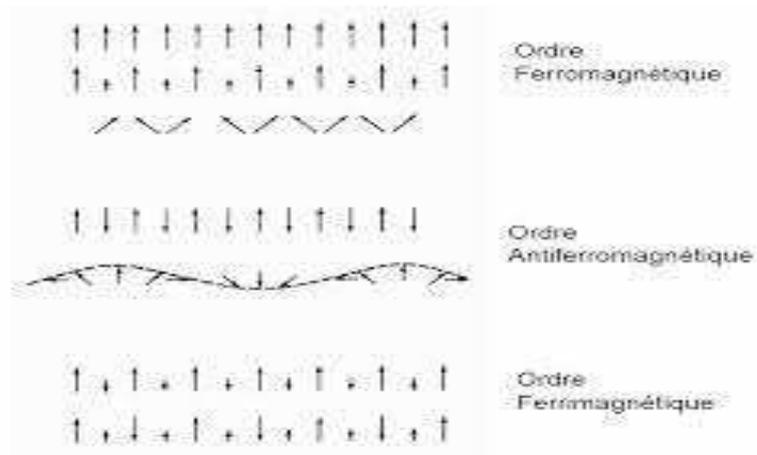
#### I.5.4. Antiferromagnétisme

Grâce à ce que nous avons déjà étudié, il est possible de dire que dans les matériaux antiferromagnétiques, l'interaction d'échange est telle que ces matériaux se décomposent en deux sous-réseaux ferromagnétiques de sens opposé. La susceptibilité magnétique de ces matériaux est positive mais généralement plus faible que celle des matériaux ferromagnétiques. De manière similaire aux ces derniers, pour des températures supérieures à une température critique, appelée température de Néel  $\theta_N$ , ces matériaux se comportent comme des paramagnétiques. Si le couplage des spins d'électrons aboutit à un alignement antiparallèle, les spins s'annuleront et aucun moment magnétique se produira. C'est ce qu'on appelle l'antiferromagnétisme [14].

#### I.5.5. Ferrimagnétisme

Nous remarquons que les moments magnétiques des atomes ne sont pas égaux et ils sont alignés de manière antiparallèle, donc le moment magnétique total dans un sens est supérieur à celui de l'autre sens, alors le moment magnétique total du matériau n'est pas nul. La susceptibilité magnétique reste élevée jusqu'à la température de Néel  $\theta_N$  [15].

La Figure I.6 montre une représentation des directions des dipôles des cristaux ferromagnétique, antiferromagnétique et ferrimagnétique.



**Figure I.6-** Représentation des dipôles magnétiques dans un cristal ferromagnétique, antiferromagnétique et ferrimagnétique.

**Références**

- [1] S. Krishnamoorthy, *Nanomaterials: A guide to fabrication and Applications*, (CRC Press, Taylor and Francis Group, New York (2015).
- [2] N.F. Mott, *Proc. Roy. Soc. A* 153 (1936) 699.
- [3] A. Fert et I. A. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* 21 (1968) 1190, *J. Physique* 32 (1971) C1-46, *J. Phys. F* 6 (1976) 849.
- [4] M. marins de castro suza, « Commutation précessionnelle de mémoire magnétique avec polariseur à anisotropie perpendiculaire ». Thèse de doctorat, Université de Grenoble (2011).
- [5] S. Bandiera. « Jonctions tunnel magnétiques à anisotropie perpendiculaire et écriture assistée thermiquement ». Thèse de doctorat. Université de Grenoble (2006).
- [6] S. Merad Boudia « Etude des propriétés structurales et magnétiques du semiconducteur magnétique dilué GeMn ». Mémoire de master, Université de Tlemcen (2012).
- [7] F. Cardarelli, *Materials Handbook: A Concise Desktop Reference*, Springer Verlag, (2008), 2eme édition, 1340.
- [8] W.J. Gallagher and S. P. P. Parkin, « Development of the magnetic tunnel junction MRAM at IBM: From. rst junctions to a 16-Mb MRAM demonstrator chip ». *IBM J. Res. & Dev.* 50 (2006), 1-5.
- [9] Y. Aoki, Y. Orimoto, A. Imamura, “Quantum Chemical Approach for Organic Ferromagnetic Material Design”, First Edition, (2017), ISBN : 978-3-319-49827-0.
- [10] F. Leprince-Ringuet, “Matériaux ferromagnétiques usuels”, *Article techniques de l'ingénieur*, (1994).
- [11] S. Zhang, “Electric-Field Control of Magnetization and Electronic Transport in Ferromagnetic/Ferroelectric Heterostructures”, First Edition, (2014), ISBN: 978- 3-642-54838-3.
- [12] R.A. McCurrie, “Ferromagnetic Materials, Structure and Properties”, (1994), ISBN: 0-12-482495-1.
- [13] K. Hoselitz, “Ferromagnetic Properties of Metals and Alloys”, First Edition, (1952).
- [14] D. Jiles, “Introduction to Magnetism and Magnetic Materials”, (1991), ISBN: 978-0-412-38640-4.
- [15] Perez, Carles, Fleckinger, “Electromagnetisme : fondements et applications”, Fourth Edition, (2002), ISBN: 2-10-005574-7.

## **CHAPITRE II :**

# ***Généralités sur les alliages Heusler et semi-Heusler***

## II.1. Introduction

L'ingénieur allemand Friedrich Heusler a découvert en 1903 au cours de son travail un alliage contenant du cuivre, du manganèse et de l'aluminium avec une formule de type  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  [1, 2]. Cet alliage se comporte comme un matériau ferromagnétique, malgré que ses éléments constitutifs ne soient pas des matériaux magnétiques [3,4].

Les alliages Heusler sont des composés constitués des matériaux ternaires semi-conducteurs ou métalliques avec une structure cristalline cubique à faces centrées et ils sont classés en deux grandes familles en fonction de leur composition chimique. La première famille est la famille des Heusler (Full-Heusler) avec une stœchiométrie de type 2:1:1. Les alliages appartenant à cette famille ont une composition chimique de la forme  $\text{X}_2\text{YZ}$ , où X et Y sont des métaux de transition et Z est un semi-conducteur ou un métal non magnétique. La deuxième famille est de type 1:1:1 connus sous le nom semi-Heusler (Half-Heusler) avec une formule chimique XYZ. Un grand nombre d'alliages Heusler des deux familles est possible d'être formé par la combinaison des différents éléments selon le schéma de couleurs présenté de la Figure II.1.

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

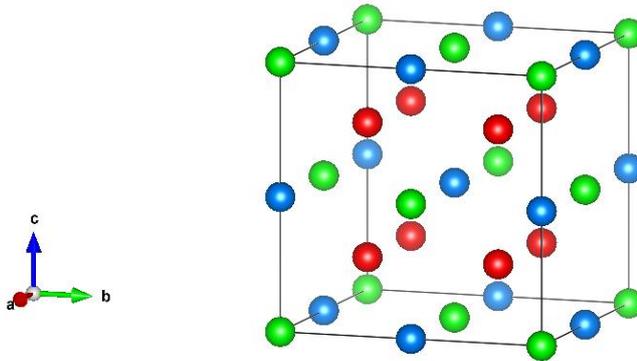
**Figure II.1** – Répartition des éléments composants des alliages dans le tableau périodique. Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert [5].

## II.2. Alliages Heusler (Full-Heusler)

Les alliages Heusler (Full-Heusler) sont des alliages ternaires composés de deux métaux de transition X, Y et Z est un l'élément de groupe III, IV, V dans le tableau périodique. Dans certain cas, l'élément Y peut être remplacé par des terres rares ou par un métal alcalino-terreux. L'emplacement de l'atome double X se situe toujours en début de la formule, par contre l'atome Z est placé à la fin.

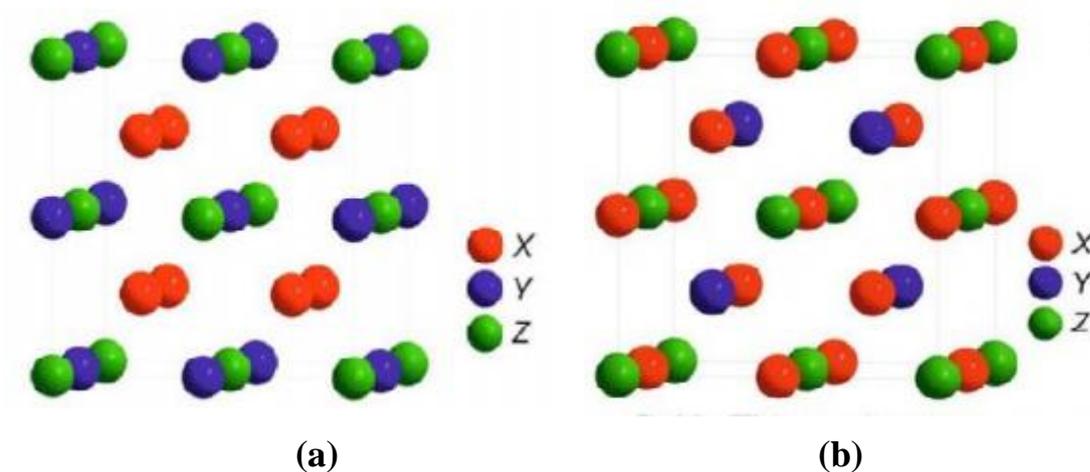
### II.2.1. Structure cristalline

Ces alliages sont caractérisés par la formule chimique  $X_2YZ$  et la maille conventionnelle cubique avec un groupe d'espace Fm-3m (N° 225) [4]. Les alliages de ce type se cristallisent dans la structure  $Cu_2MnAl$  noté souvent ( $L2_1$ ). Les atomes X, Y et Z occupent respectivement les positions de Wyckoff 8c, 4a et 4b. Les atomes X occupent les sites tétraédriques 8c ( $1/4, 1/4, 1/4$ ), les atomes Y occupent les sites octaédriques 4b ( $1/2, 1/2, 1/2$ ) et les atomes Z sont placés au sommet 4a (0, 0, 0) et au centres des faces.



**Figure II.2** - Structure de l'alliage Heusler (full-Heusler). Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert.

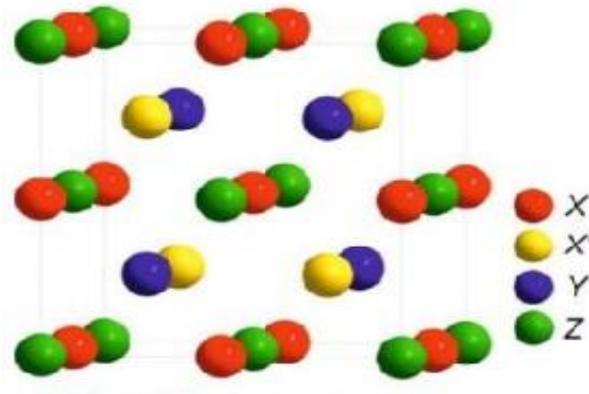
Dans le cas où le nombre de valence de Y est plus élevé que celui de X de la même période ( $Z(Y) > Z(X)$ ), une structure inverse différente est observée [6]. Ces alliages Heusler inverses sont désignés dans la littérature par X, avec le prototype  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$ . La structure inverse cristallise dans le groupe d'espace N°216 (groupe d'espace cubique F-43m) [4]. La Figure II.3 indique la différence entre les deux structures des alliages Heusler régulière et inverse.



**Figure II.3** - Les deux structures Heusler (Full-Heusler) : (a) régulière et (b) inverse.

### II.2.2. Composés Heusler quaternaires

Il y a une autre famille des alliages Heusler, c'est le cas de composés Heusler quaternaires. Leur formule générale est  $\text{XX}'\text{YZ}$ , il y a deux éléments différents X et X'. La valence des atomes X' est inférieure à la valence des atomes X, et la valence de Y est strictement inférieure à celle des deux (X et X'). Ils sont situés dans les positions 4a et 4d, respectivement ; l'élément Y est placé sur les positions 4b et Z sur les positions 4c.  $\text{XX}'\text{YZ}$  cristallise dans la structure cubique de type  $\text{LiMgPdSn}$  (groupe d'espace N° 216) [4]. La Figure II.4 montre la structure des alliages Heusler quaternaire.



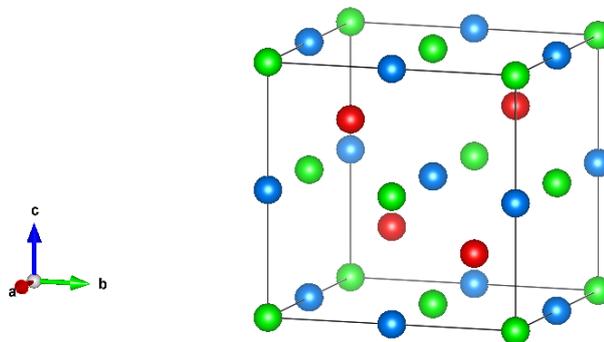
**Figure II.4** - Structure des alliages Heusler quaternaire

### II.3. Les alliages Semi-Heusler (Half-Heusler)

Les alliages semi-Heusler (Half-Heusler) sont des intermétalliques ternaires définies par la formule générale XYZ, ces composés sont constitués de deux parties, une partie est covalente et l'autre ionique. Les atomes qui occupent les sites X et Y possèdent un caractère cationique, alors que le site Z est considéré comme l'équivalent anionique [5, 7].

#### II.3.1. Structure cristalline

Les alliages semi-Heusler XYZ cristallisent dans une structure cubique, groupe d'espace  $F-43m$  (N° 216) [4] connue sous la structure  $C1_b$ . La structure semi-Heusler peut être considérée comme trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les éléments X, Y et Z, qui occupent respectivement les positions de Wyckoff  $4c$  ( $1/4, 1/4, 1/4$ ),  $4b$  ( $1/2, 1/2, 1/2$ ) et  $4a$  ( $0, 0, 0$ ). La structure de l'alliage semi-Heusler est représentée dans la Figure II.5.



**Figure II.5** - Structure de semi-Heusler (Half-Heusler). Les éléments X en rouge, Y en bleu et Z en vert.

En principe, trois arrangements atomiques non équivalents sont possibles dans ce type de structure comme indiquant dans le tableau II.1. La structure semi-Heusler  $C1_b$  peut être considérée comme un sous-réseau ZnS avec les positions 4a et 4c, et même les sites octaédriques 4b sont occupés. Cette description explique l'interaction de la liaison covalente entre deux éléments contenus et qui définit les propriétés électroniques du matériau. Selon cette description, les atomes sur les sites 4a et 4b forment un sous-réseau de type Rock-Salt (NaCl), dont l'ordre ionique dépend de la nature chimique des éléments.

**Tableau II.1** - Différents type d'occupations des sites non équivalents dans la structure de type  $C1_b$ .

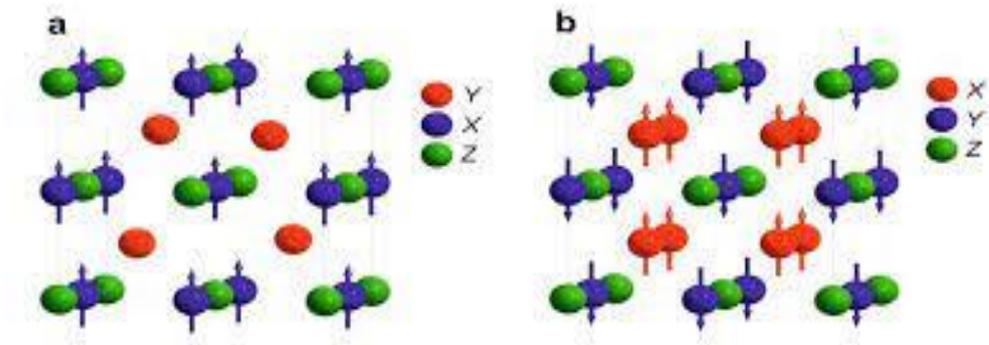
Atome	X	Y	Z
1 <sup>er</sup> arrangement	4a	4b	4c
2 <sup>eme</sup> arrangement	4b	4c	4a
3 <sup>eme</sup> arrangement	4c	4a	4b

#### II.4. Le Magnétisme et les alliages Heusler :

L'année 1903, Friedrich Heusler a constaté que le composé  $Cu_2MnAl$  devient ferromagnétique, bien que ses éléments constitutifs ne sont pas ferromagnétiques [1, 2]. Malheureusement, Il a fallu attendre la prédiction du ferromagnétisme semi-métallique dans  $MnNiSb$  par de Groot et al. et dans  $Co_2MnSn$  par Kübler et al. en 1983, pour que les matériaux Heusler retrouvent un intérêt scientifique.

Les composés semi-Heusler  $XYZ$  présentent un sous-réseau magnétique puisque seulement les atomes sur les sites octaédriques portent un moment magnétique localisé, comme indiqué dans la Figure II.6 (a) [8].

Dans les composés Heusler  $X_2YZ$ , la situation est complètement différente à cause des deux atomes X qui occupent les sites tétraédriques ; ce qui permet une interaction magnétique entre les atomes X et la formation d'un second sous-réseau magnétique plus délocalisé, comme indiqué dans la Figure II.6 (b) il y a deux sous réseaux magnétiques où nous pouvons trouver un couplage ferromagnétique ou antiferromagnétique. En raison de ces deux sous-réseaux magnétiques différents, les composés Heusler  $X_2YZ$  peuvent montrer toutes sortes de phénomènes magnétiques, aujourd'hui plusieurs types sont connus tel que ferromagnétisme, ferrimagnétisme et ferromagnétisme semi-métallique [8].



**Figure II.6** - (a) Alliages semi-Heusler de type XYZ (b) Les alliages Heusler de X<sub>2</sub>YZ

**Références**

- [1] F. Heusler, W. Starck, and E. Haupt, Verh DPG 5, (1903)220.
- [2] F. Heusler, Verh. DPG 5, (1903)219
- [3] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, Verh DPG 5 (1903) 220.
- [4] H. Abbassa, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse de doctorat (2015).
- [5] A. Neggache, « Propriétés électroniques des alliages d'Heusler  $\text{Co}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Ge}$  et  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  », Université de Lorraine, Thèse de doctorat (2014).
- [6] M. Puselj, Z. Ban, Croat Chem Acta 41 (1969) 79.
- [7] S. Sakurada, N. Shutoh, Appl Phys Lett 86 (2005) 082105.
- [8] J. Kübler, A.R. Williams, C.B. Sommers, Phys Rev B 28 (1983) 1745.

# **Chapitre III :**

## ***Résultats et discussions***

### III.1. Introduction

Notre travail a pour objectif d'examiner les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn). Ensuite nous avons étudié les propriétés mécaniques des quatre composés.

### III.2. Méthode de calcul

#### III.2.1. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de la densité (*Density Functional Theory*, DFT) est une méthode de calcul quantique. Elle est introduite au milieu des années soixante par les chercheurs Hohenberg, Kohn [1], et Sham [2,3], et utilisée dans le cadre de la simulation numérique en physique et en chimie. Selon la théorie de la fonctionnelle de la densité, il est possible de décrire les propriétés de l'état fondamental d'un solide à partir de sa densité électronique [4].

La DFT devient plus vite une des méthodes les plus largement utilisées dans les calculs ab-initio de la structure d'atomes, de molécules, de cristaux et de surfaces.

##### III.2.1.1. L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger indépendante du temps d'un système de N électrons dans l'état stationnaire, cette équation est donnée par la formule suivante :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{III.1})$$

- ✓ Où H est l'hamiltonien du système, E est l'énergie de l'état fondamental et  $\psi$  est la fonction d'onde de ce système. Généralement, l'opérateur hamiltonien s'écrit :

$$H = T_n + V_{n-n} + V_{n-e} + V_{e-e} + T_e \quad (\text{III.2})$$

- ✓  $T_n$  est l'énergie cinétique des noyaux.
- ✓  $V_{n-n}$  l'énergie potentielle de répulsion entre les noyaux.
- ✓  $V_{n-e}$  l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.
- ✓  $V_{e-e}$  l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.
- ✓  $T_e$  l'énergie cinétique des électrons.

### III.2.1.2. Théorème de Hohenberg et Kohn

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est fondée sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn qui sont relatifs à tout système d'électrons (fermions) dans un champ externe  $V_{ext}(r)$  tel que celui induit par les noyaux. Ces théorèmes sont les suivants [1,3] :

**Théorème 1:** « Pour un système d'électrons en interaction, le potentiel externe  $V_{ext}(r)$  est uniquement déterminé, à une constante près, par la densité électronique de l'état fondamental  $\rho_0(r)$ . Toutes les propriétés du système sont déterminées par la densité électronique de l'état fondamental  $\rho_0(r)$  » [5].

**Théorème 2:** « L'énergie totale du système peut alors s'écrire comme une fonctionnelle de la densité électronique,  $E = E[\rho(r)]$  et le minimum de l'énergie totale du système correspond à la densité exacte de l'état fondamental  $\rho(r) = \rho_0(r)$  (principe variationnel). Les autres propriétés de l'état fondamental sont aussi des fonctions de cette densité électronique de l'état fondamental » [5].

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{III.3})$$

$\rho_0$ : La densité de l'état fondamental.

La fonctionnelle de l'énergie totale de l'état fondamental s'écrit comme suit :

$$E[\rho(r)] = F[\rho(r)] + \int V_{ext}(r)\rho(r)d^3r \quad (\text{III.4})$$

La fonctionnelle  $F[\rho]$  est valable pour n'importe quel système à plusieurs électrons

### III.2.1.3. Les équations de Kohn-Sham

En 1965, Kohn et Sham ont publié une méthode pratique permettant d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT. L'approche de Kohn et Sham propose de remplacer un système (gaz d'électrons) en interaction qui est impossible de le résoudre par un autre équivalent fictif où les particules évoluent dans un potentiel effectif (ces particules n'interagissent pas). Ce nouveau système a la même densité  $\rho(r)$  que le système réel (en interaction). Les équations de Kohn-Sham est donnée par la formule suivante [6]:

$$H_{KS}\psi_i = [T_e(r) + V_{eff}]\psi_i = \xi_i \psi_i \quad (\text{III.5})$$

Où :

✓  $\xi_i$  l'énergie de l'état  $\psi_i(r)$

- ✓  $T_c(r)$  est l'opérateur énergie cinétique des particules fictives sans interaction

Les particules fictives subissent un potentiel effectif  $V_{\text{eff}}$ , qui est la somme de trois potentiels :

$$V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{ext}}(r) + V_H(r) + V_{\text{XC}}(r) \quad (\text{III.6})$$

- ✓  $V_{\text{XC}}$  le potentiel d'échange-corrélation
- ✓  $V_H$  est le potentiel de Hartree

Ces deux potentiels s'expriment en fonction de la densité électronique :

$$V_{\text{XC}}(r) = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} d^3r' \quad (\text{III.7})$$

$$V_H(r) = \frac{\delta E_{\text{XC}}[\rho]}{\delta \rho(r)} \quad (\text{III.8})$$

#### III.2.1.4. Les approximations d'échange-corrélation

Parmi les approximations les plus utilisées actuellement pour décrire l'énergie d'échange-corrélation d'un système électronique est l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation des gradients généralisés (GGA) [7]:

##### L'approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation LDA est la base de toutes les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation définie par l'équation suivante :

$$E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{\text{xc}}(\rho(r)) dr \quad (\text{III.9})$$

La méthode LDA a tendance à sous-estimer le terme d'échange alors qu'elle surestime le terme de corrélation, ce qui à cause de la compensation entre ces deux termes donne au final d'assez bon résultat. Néanmoins elle ne décrit pas bien les systèmes où la densité varie brusquement [7].

##### L'approximation des gradients généralisés (GGA)

L'approximation GGA est une correction des défauts de la LDA en implémentant une dépendance au gradient de  $\rho(r)$  au terme d'échange-corrélation. Cela dans le but de décrire les variations locales de la densité électronique [7].

$$E_{\text{xc}}^{\text{GGA}}[\rho\alpha, \rho\beta] = \int \rho(r) \varepsilon_{\text{xc}}(\rho\alpha, \rho\beta, \nabla\rho\alpha, \nabla\rho\beta) dr \quad (\text{III.10})$$

Dans les équations (III.9), (III.10) :

$E_{xc}^{GGA}$ ,  $E_{xc}^{LDA}$  représentent l'énergie d'échange et corrélation calculée respectivement en GGA et en LDA,  $\varepsilon_{xc}$  l'énergie d'échange et corrélation par électron baignant dans un gaz de densité uniforme  $\rho$  [7].

### III.2.2. La méthodes des pseudo-potentiels et ondes planes

L'idée fondamentale d'un pseudo-potentiel est le remplacement d'un potentiel avec un autre. L'application primaire en structure électronique est de remplacer le potentiel fort de coulomb du noyau et des effets des électrons étroitement liés au noyau (les électrons du cœurs) par un potentiel ionique efficace agissant sur les électrons de valence [8]. L'approche pseudo-potentielle (PP) utilise une description quantique pour les interactions électroniques dans le cadre de la DFT. Elle consiste en un couplage d'ondes planes et de pseudo-potentiel au moyen d'une technique de transformée de Fourier [9].

Cette méthode apparaît comme extrêmement précise et raisonnablement rapide pour la simulation des matériaux et a déjà démontré son efficacité dans l'étude de divers types de matériaux [10]. Le problème qui se pose est que les calculs deviennent de plus en plus coûteux au fur et à mesure que la taille des atomes augmente, à cause d'une part, de l'augmentation du nombre d'électrons et d'autre part du caractère localisé de certaines orbitales, comme par exemple les orbitales d (notre cas de simulation). Le fait que les orbitales de Kohn-Sham doivent être orthogonales entre elles, ce qui induit une augmentation importante de l'énergie cinétique maximale, c'est-à-dire du nombre d'ondes planes, avec le nombre d'électrons [11]. Il est maintenant bien connu que la combinaison de la puissance de la technologie d'ondes planes et du concept pseudo-potentiel est extrêmement utile pour la description de la liaison chimique [12].

L'ensemble des ondes planes est une base de projection des fonctions d'ondes, utilisée depuis 30 ans, on la retrouve dans de nombreux codes: CASTEP, CPMD, Abinit, VASP,... Dans le cadre de la théorie de la DFT, la base des ondes planes sont associées à des conditions aux limites périodiques, très répandues, en particulier pour l'étude des solides, car elles satisfont par construction le théorème de Bloch.

### III.2.3. Détails de calcul

Les calculs effectués au cours de ce travail repose sur l'utilisation de l'approximation GGA (L'approximation des gradients généralisés) celle de PBE (Perdew-Burke Ernzerhof),

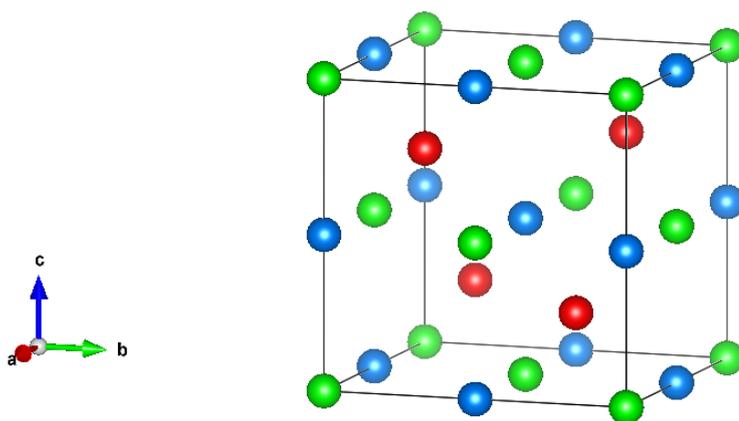
basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Cette théorie est mise en application par le code VASP (Vienna Ab initio Simulation Package). Nous avons utilisé les pseudo-potentiels PAW qui sont les plus performants pour les systèmes magnétiques par rapport les pseudo-potentiels ultra doux. La configuration électronique considérée dans les pseudo-potentiels PAW des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn) est donnée dans le tableau III.1.

**Tableau III.1.** Configuration électronique des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn)

Atome	Configuration électronique
Rh	$s^1d^8$
As	$s^2p^3$
Ti	$d^3s^1$
Mn	$d^6s^1$
V	$d^4s^1$
Cr	$d^5s^1$

### III.3. Structure cristalline des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn)

Les composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn) cristallisent dans une structure cubique, groupe d'espace F-43m (N° 216) connue sous la structure C1<sub>b</sub> (Figure III.1). La structure peut être considérée comme trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes X(Rh), Y (Cr, Mn, V, Ti) et Z(As). Les positions occupées sont respectivement 4c (1/4,1/4,1/4), 4b (1/2,1/2,1/2) et 4a (0, 0, 0).

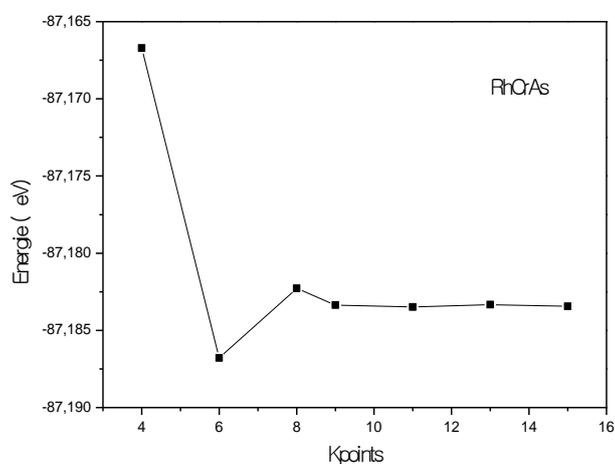


**Figure III.1-** Structure cristalline des composés semi-Heusler RhYAs. Rh en rouge, Y(Y=Cr, Mn, Ti, V) en bleu et As en vert.

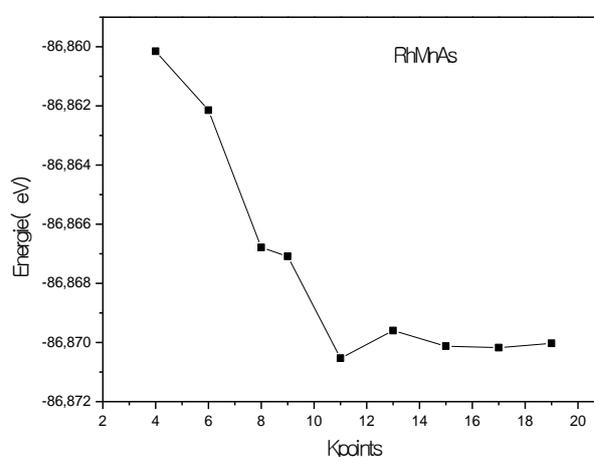
### III.4. Test de convergence

#### III.4.1. Choix du nombre de K-points

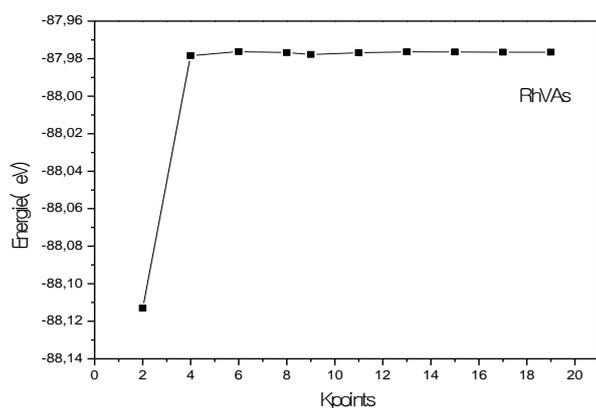
Nous avons commencé notre étude par l'optimisation du nombre de points « k » en utilisant la méthode de la Monkhorst-Pack [13]. La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points-k des composés RhYAs (Y=Cr, Mn, Ti, V) est représentée sur la Figure III.2. On remarque que la convergence a été obtenue à partir d'une mèche de  $11 \times 11 \times 11$  pour le composé RhCrAs,  $17 \times 17 \times 17$  pour le composé RhMnAs,  $13 \times 13 \times 13$  pour les composés RhTiAs et RhVAs. Ces valeurs représentent les valeurs optimisées.



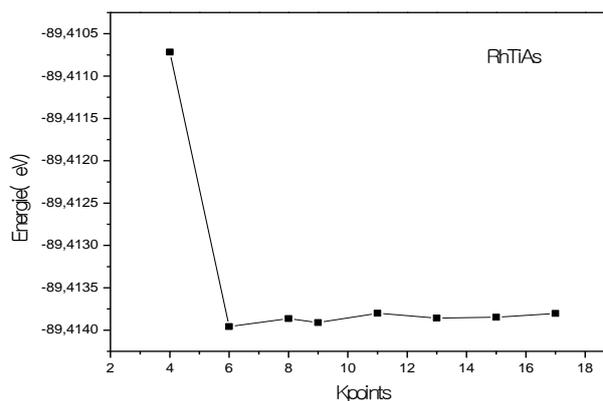
(a)



(b)



(c)

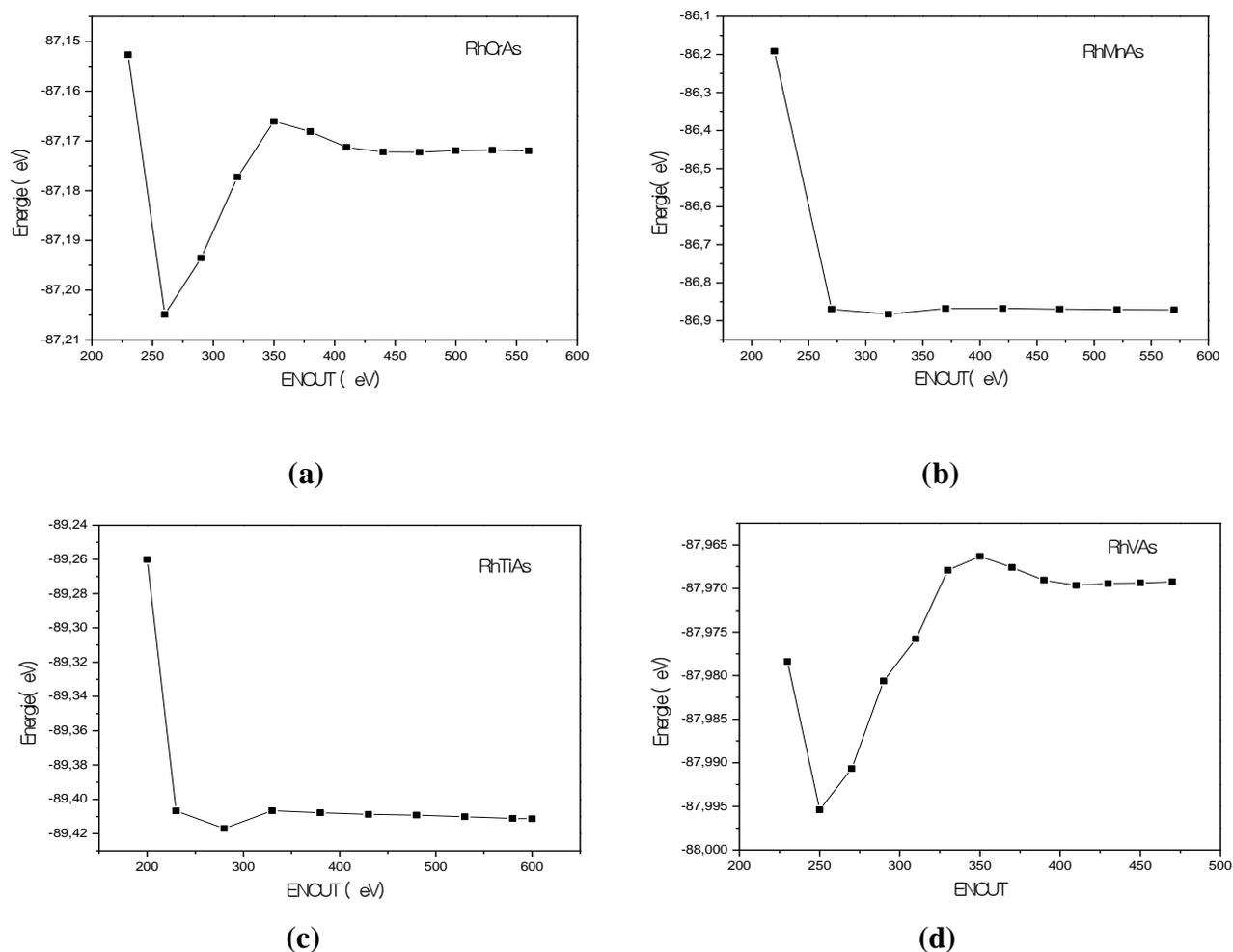


(d)

**Figure III.2-** Variation de l'énergie totale en fonction du nombre du K-points pour (a) RhCrAs, (b) RhMnAs, (c) RhTiAs et (d) RhVAs

### III.4.2. Choix de l'énergie de coupure

La Figure III.3 représente la variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure ( $E_{cut}$ ) des quatre composés. Les courbes montrent que la convergence d'énergie de coupure minimisant le nombre de bases d'ondes planes est atteinte à 470 eV pour RhCrAs, 520 eV pour RhMnAs, 530 eV pour RhTiAs et 430 eV pour RhVAs.

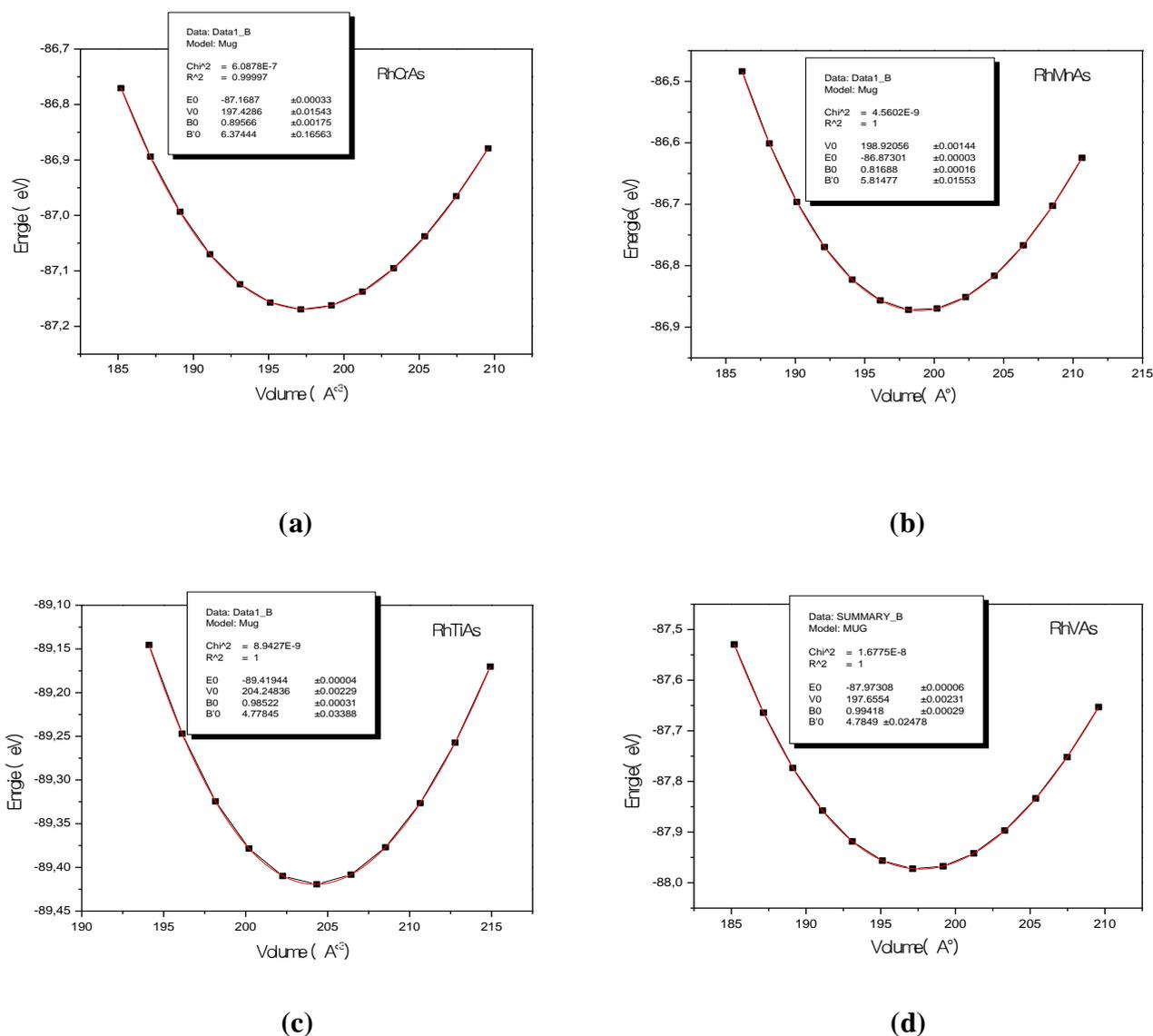


**Figure III.3-** Variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure ( $E_{cut}$ ) pour (a) RhCrAs, (b) RhMnAs, (c) RhTiAs et (d) RhVAs

### III.5. Propriétés structurales

La détermination des paramètres d'équilibre a été effectuée en minimisant l'énergie totale en fonction du volume  $V$ . La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour

les composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn) est illustrée sur la Figure III.4. Les valeurs des paramètres de maille  $a$ , des volumes  $V$  et des modules de compression  $B$  sont reportées et comparées aux valeurs théoriques existantes dans la littérature dans le tableau III.2. Nous remarquons que nos résultats sont en bon accord avec d'autres travaux théoriques.



**Figure III.4-** Variation de l'énergie totale en fonction de volume pour les composés (a) RhCrAs, (b) RhMnAs, (c) RhTiAs et (d) RhVAs

**Tableau III.2-** Les paramètres de maille et les modules de compression optimisés des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn)

Composés	a (Å)	V (Å <sup>3</sup> )	B (GPa)
RhCrAs	5.82 5.81 <sup>a</sup>	197.42 -	143.30 -
RhMnAs	5.83 5.83 <sup>a</sup>	198.92 -	130.70 -
RhTiAs	5.88 5.87 <sup>a</sup>	204.42 -	157.63 -
RhVAs	5.82 5.81 <sup>a</sup>	197.65 -	159.54 -

Réf (a) [14]

**Energie de formation**

Afin de déterminer la stabilité énergétique, nous avons calculé les énergies de formation. L'énergie de formation d'un cristal ( $E_f$ ) est la différence entre l'énergie du cristal et la somme des énergies des éléments dans leurs états standards.

L'équation d'énergie de formation est donnée par la formule suivante:

$$E_{f(RhYAs)} = E_{Tot} - (E_{Rh} + E_Y + E_{As}) \quad (III.11)$$

- ✓  $E_{tot}$  :représente l'énergie totale de la maille unitaire
- ✓  $E_{Rh}$ ,  $E_Y$  et  $E_{As}$  sont les énergies par atome

Une  $E_f$  négatif indique que la phase formée est stable. Les énergies de formation calculées des quatre composées à partir de l'équation (III.11) sont données dans le tableau III.3. D'après ce tableau, les énergies de formation des quatre composés prennent des valeurs négatives, ceci signifie l'existence et la stabilité de ces composés. Nous pouvons noter que RhTiAs est le plus stable.

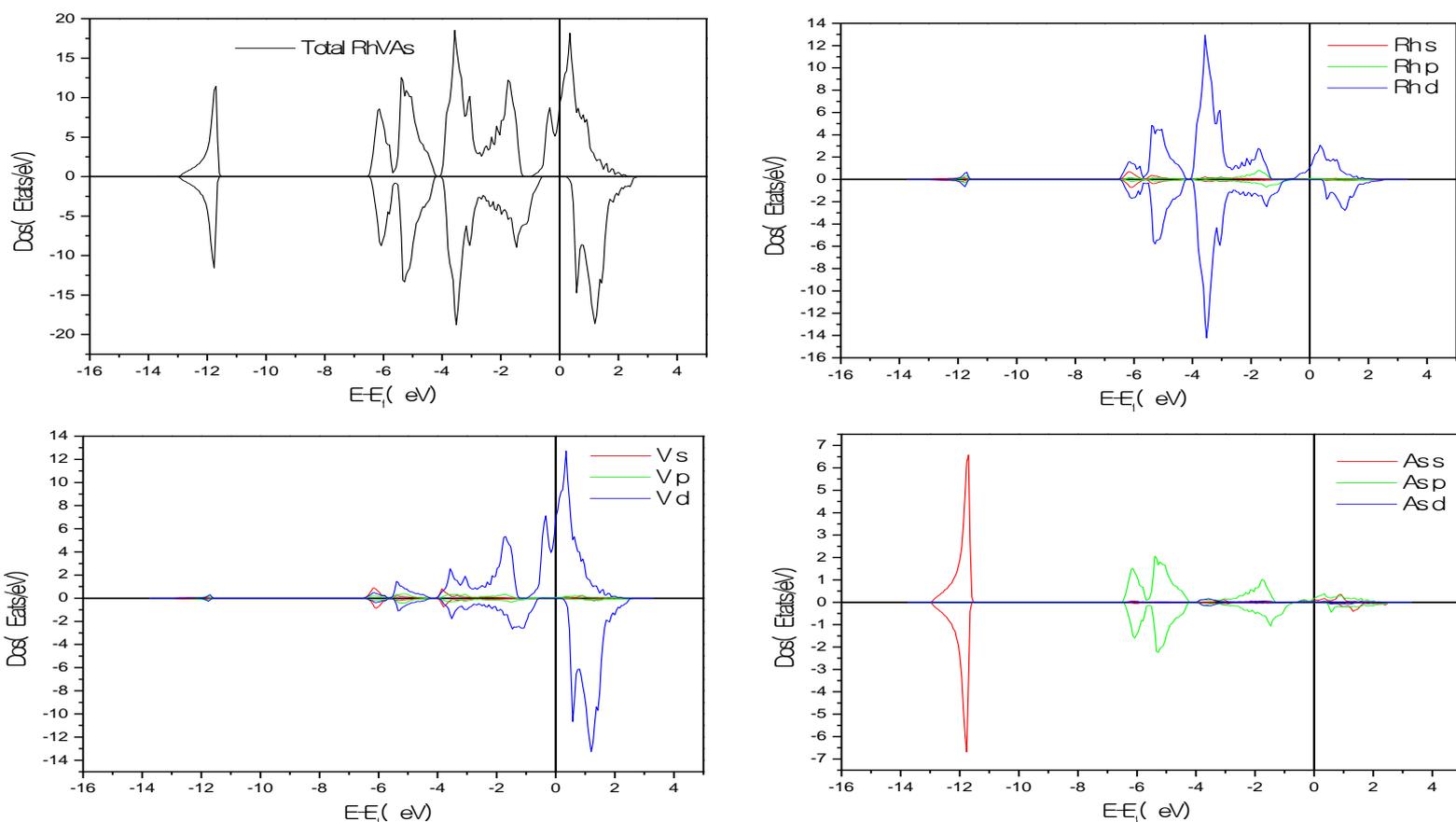
**Tableau III.3-** Les énergies de formation des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, Mn)

Composés	RhTiAs	RhVAs	RhCrAs	RhMnAs
$E_f$ (eV/atome)	-0.873146	-0.364253	-0.107651	-0.276914

### III.6. Propriétés électroniques

Les Figures III.5, III.6, III.7 et III.8 montrent les densités d'états totales et partielles des composés RhYAs ( $Y = V, Ti, Cr, Mn$ ), respectivement.

- Pour les composés RhVAs, RhCrAs et RhMnAs, nous pouvons remarquer un caractère semi-métallique. Où dans les spins majoritaires, il y a un caractère métallique dû aux états 3d de V, Cr et Mn. Dans les spins minoritaires, nous remarquons la présence d'un gap. Les valeurs d'énergies de gap des spins minoritaires sont affichées dans le tableau III.4.
- Pour le composé RhTiAs, nous pouvons remarquer la symétrie des états des spins majoritaire et minoritaire ; ce qui montre un état non- magnétique. Il y a aussi la présence d'un gap de 0.789 eV, ce qui indique un caractère semi-conducteur.



**Figure III.5-** Densité d'états totale et partielle du RhVAs

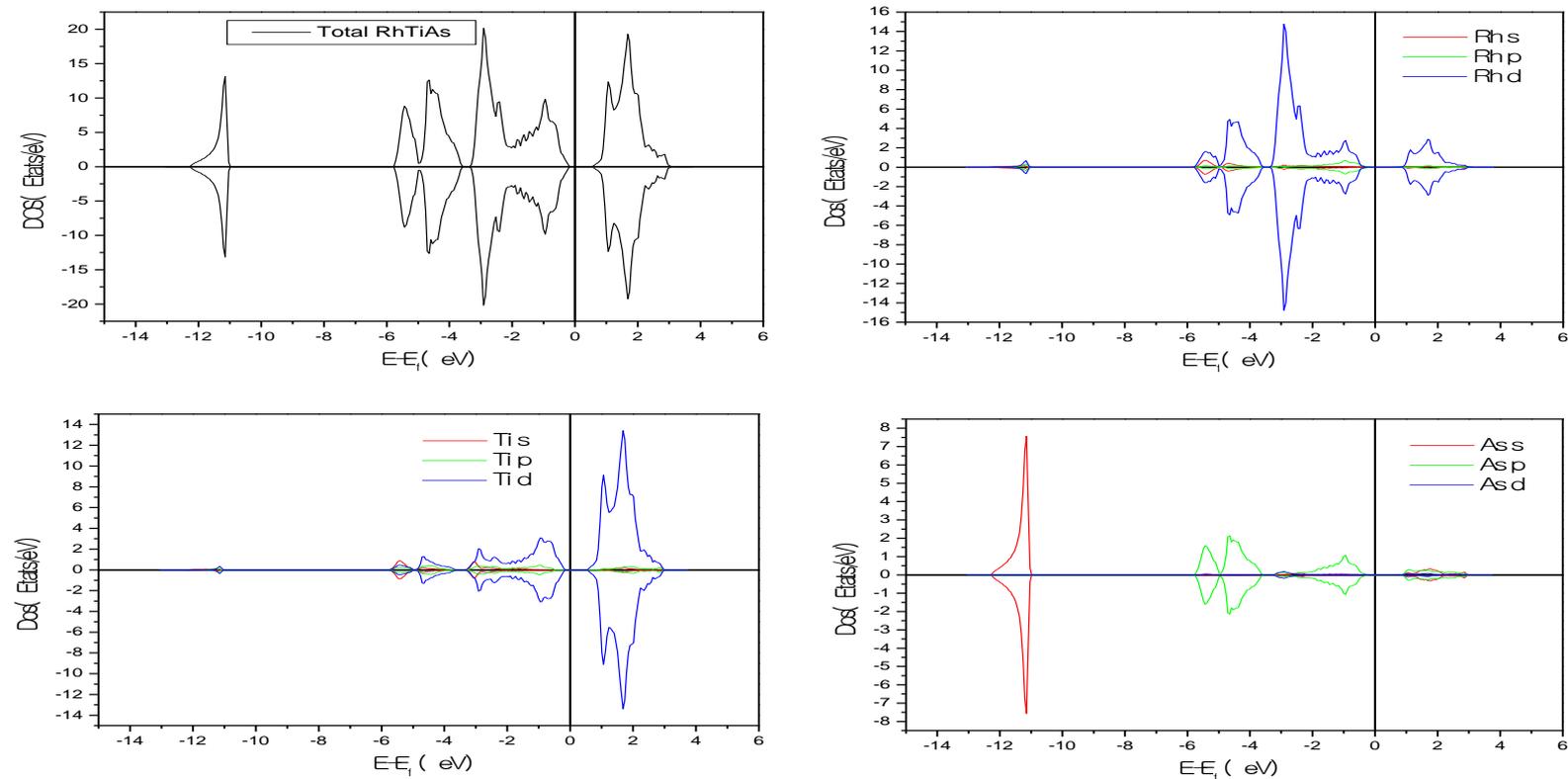


Figure III.6- Densité d'états totale et partielle du RhTiAs

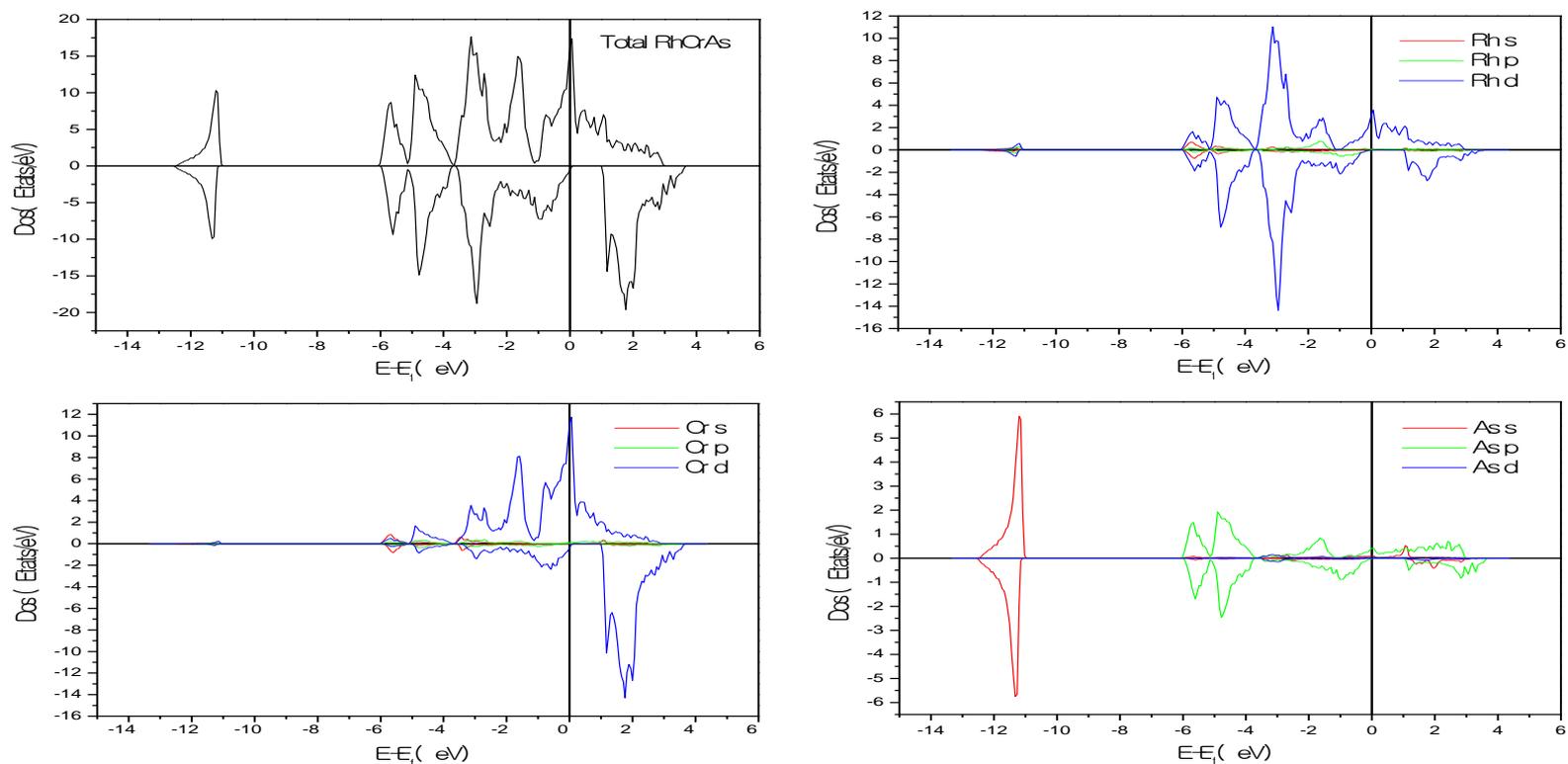
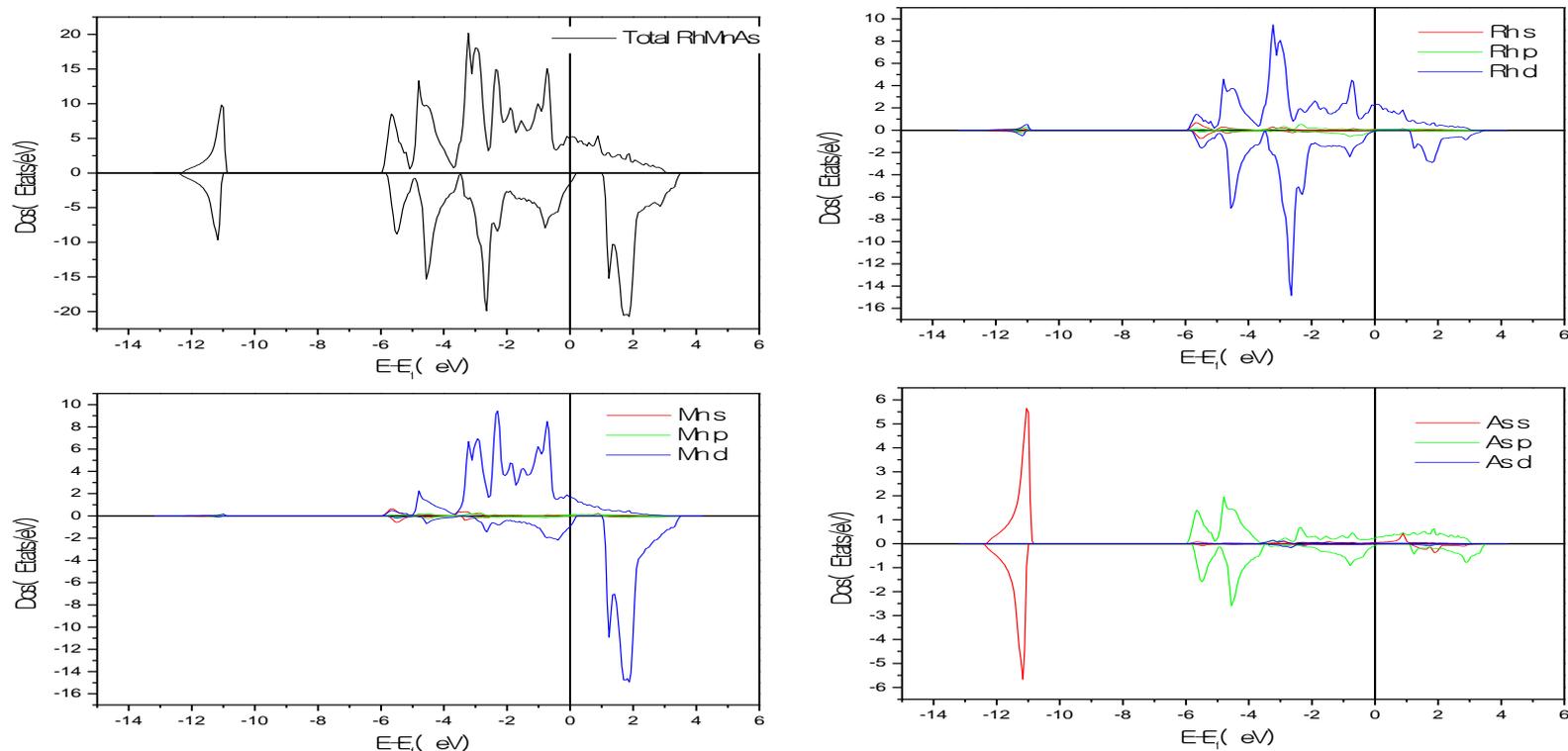


Figure III.7- Densité d'états totale et partielle du RhCrAs



**Figure III.8-** Densité d'états totale et partielle du RhMnAs

**Tableau III.4-** Les énergies de gap des composés RhYAs (Y = V, Ti, Cr, Mn)

Composés	Spin up ↑	Spin down ↓	Energie de gap $E_g$ (eV)
RhVAs	<b>Métallique</b>	<b>Semi-conducteur</b>	0.894
RhTiAs	<b>Semi-conducteur</b>	<b>Semi-conducteur</b>	0.789
RhCrAs	<b>Métallique</b>	<b>Semi-conducteur</b>	0.904
RhMnAs	<b>Métallique</b>	<b>Semi-conducteur</b>	0.737

### III.7. Propriétés magnétiques

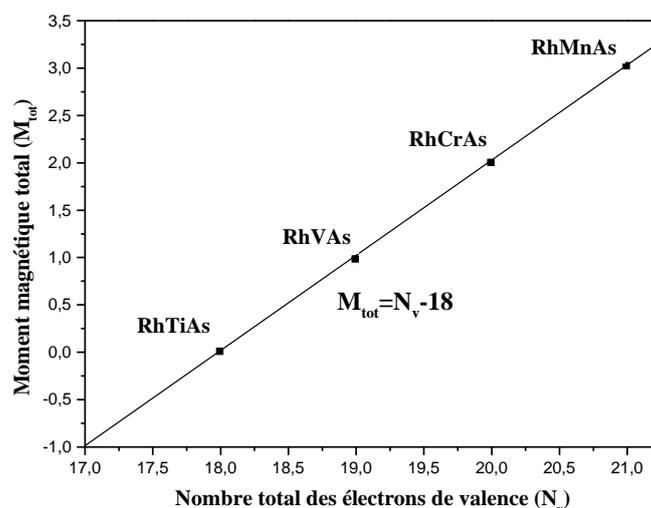
Les valeurs calculées des moments magnétiques total et partiels des composés RhYAs (Y = Ti, Cr, V, Mn) sont données dans le tableau III.5. Pour le composé RhTiAs, nous avons trouvé des moments magnétiques nuls, ce qui explique la symétrie des états des spins majoritaire et minoritaire des densités d'états total et partielles. Nous pouvons conclure que le composé RhTiAs est un semi-conducteur non magnétique.

Pour les composés RhVAs, RhCrAs et RhMnAs, nous pouvons observer que la contribution des atomes Rh et As aux moments magnétiques totaux est faible ; par contre la principale contribution au moment magnétique total de chaque composé provient des atomes Y (Y = Cr, V, Mn).

Pour les composés Semi-Heusler semi-métallique de structure C1<sub>b</sub>, le moment magnétique total suit la règle de Slater Pauling  $M_{tot} = N_V - 18$ , où  $N_V$  est le nombre total des électrons de valence. La Figure III.9 représente les moments magnétiques calculés ( $M_{tot}$ ) en fonction du nombre total des électrons de valence pour les composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn). Où la ligne droite représente la courbe Slater-Pauling. Nos calculs confirment cette règle, ce qui indique que les composés RhYAs (Y=V, Cr, Mn) ont un caractère semi-métallique parfait. Ces résultats confirment les DOSs calculés.

**Tableau III.5-** Les valeurs calculées des moments magnétiques total et partiels en  $\mu_B$  des composés RhYAs (Y = Ti, Cr, V, Mn)

Composés	$M_{Rh}$	$M_Y$	$M_{As}$	$M_{Tot}$
RhTiAs	-0	0	-0	0
RhCrAs	-0.287	2.380	-0.099	1.994
RhVAs	-0.157	1.182	-0.048	0.977
RhMnAs	-0.177	3.305	-0.113	3.015



**Figure III.9-** Les moments magnétiques calculés en fonction du nombre total des électrons de valence pour les composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn). La ligne droite représente la courbe Slater-Pauling.

### III.8. Propriétés mécaniques

#### III.8.1. Les constants élastiques

Afin d'assurer la stabilité des composés étudiés, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés élastiques des composés présentant de bonnes propriétés mécaniques. La réponse linéaire d'un cristal élastique de symétrie arbitraire à une déformation infiniment petite est déterminée par les constantes élastiques [15]. La structure cubique est caractérisée par trois constantes élastiques ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ ).

Afin de déterminer les constantes élastiques d'un cristal à l'aide du calcul de l'énergie totale, on déforme la maille élémentaire en changeant le vecteur du réseau de Bravais de la cellule unitaire non déformée  $R = (a, b, c)$  en une autre, déformée  $R' = (a', b', c')$  et cela en utilisant une matrice de contrainte  $\delta$  telle que :

$$R' = R(1 + \delta) \quad (\text{III.12})$$

Où 1 présent la matrice unité.

La matrice de contrainte  $\delta$  est définie comme suit :

$$\delta = \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} \end{pmatrix}$$

L'énergie de déformation est donnée dans la notation de Voigt par :

$$E(v, \delta) = E(V_0, 0) + V_0 \times \sum_{K=2}^n \sum_{i_1, \dots, i_K} \frac{1}{K!} C_{i_1, \dots, i_K} \delta_{i_1, \dots, i_K} \quad (\text{III.13})$$

- ✓  $(V_0, 0)$  représente l'énergie du cristal non déformé.
- ✓  $V_0$  et  $V$  représente volumes du cristal avant et après l'application de la contrainte, respectivement.
- ✓  $C_{i_1, \dots, i_K}$  Étant à la  $K^{\text{ième}}$  constante élastique du cristal.

Les composantes de déformation sont définies par :

$$\begin{cases} \delta_K = \delta_{ij} \text{ pour } K = 1, 2, 3 \\ \delta_K = 2\delta_{ij} \text{ pour } K = 4, 5, 6 \end{cases}$$

L'énergie  $E(v, \delta)$  est évaluée en utilisant de calculs du premier principe. Un développement aux limites de Taylor de second ordre est employé pour l'ajustement des données numériques. Pour chacune des contraintes appliquées, l'énergie totale du système a été calculée pour huit

déformations différentes ( $x = \pm 0.01 \cdot n; n = 1.4$ ). La relaxation des positions internes a été également effectuée pour l'ensemble des calculs.

Les énergies  $E_i$  sont ensuite ajustées en fonction de la déformation  $x_i$  en utilisant le polynôme :

$$E(x) = a + b(x - x_0)^2 + c(x - x_0)^3 + (x - x_0)^4 \quad (\text{III.14})$$

**Tableau III.6-** Les constantes élastiques des composés RhYAs (Y=Cr, V, Ti et Mn)

Composés	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
RhCrAs	167.853	134.028	42.453
RhVAs	190.093	145.128	49.562
RhTiAs	210.169	133.250	69.365
RhMnAs	158.152	121.569	35.147

Le tableau III.6 regroupe les constantes élastiques des composés RhYAs (Y = Ti, V, Cr, As). D'après le tableau, les constantes élastiques calculées  $C_{ij}$  obéissent aux critères de stabilité de Born-Huang [16] (l'équation III.15), ces critères exigent que  $C_{12}$  soit inférieur à  $C_{11}$ . Par conséquent, les quatre composés sont mécaniquement stables.

$$\left. \begin{array}{l} C_{11} - C_{12} > 0 \\ C_{44} > 0 \\ C_{11} + 2C_{12} > 0 \end{array} \right\} \quad (\text{III.15})$$

### III.8.2. Les modules de compression, de Young, de cisaillement et le facteur d'anisotropie

Le module de compression et de cisaillement d'écrivent souvent le comportement élastique du matériau. Dans le cas des cristaux simples, ces paramètres peuvent être déterminés en utilisant les constantes  $C_{ij}$  dans le cadre des approximations de Voigt (v) [17], de Reuss (r) [18] et de Hill [19].

Pour le cas de la structure cubique, le module de compression B et de cisaillement G ont été calculés à partir des formules suivantes :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III.16})$$

$$G_v = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (\text{III.17})$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{3(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}} \quad (\text{III.18})$$

Et la résultante du module de cisaillement  $G$  est obtenue à partir de l'expression suivante :

$$G = \frac{1}{2} (G_V + G_R) \quad (\text{III.19})$$

Le module de Young  $E$  se présente comme suit :

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (\text{III.20})$$

Le coefficient de poisson  $\nu$  et le facteur d'anisotropie  $A$  peuvent être calculés en fonctions des constantes élastiques à partir des expressions suivantes :

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (\text{III.21})$$

$$A = 2 \frac{C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (\text{III.22})$$

Dans le but d'évaluer les propriétés mécaniques des composés étudiés, nous avons calculé le module de compression  $B$  (GPa), module de cisaillement  $G$  (GPa), module de Young  $E$  (GPa), facteurs d'anisotropie  $A$ , coefficient de Poisson  $\nu$  et rapport  $B/G$ . Les résultats de nos calculs sont reportés dans le tableau III.7. Les résultats obtenus montrent que :

- Les modules de compression calculés pour les quatre composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn) sont en bon accord avec les résultats obtenus à partir de l'ajustement de l'équation d'état de Murnaghan (tableau III.2).
- Le rapport  $B/G$  nous informe sur la ductilité du matériau, si le rapport  $B/G \geq 1.75$ , le matériau est ductile sinon le rapport  $B/G < 1.75$ , le matériau est fragile. Le rapport  $B/G$  des quatre composés est nettement supérieur à la valeur critique de 1.75 donc les composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn) sont ductiles. Le composé RhMnAs est le plus ductile.
- Le module de Young  $E$  renseigne sur la rigidité du matériau, nous pouvons remarquer qu'il est faible pour les quatre composés spécialement pour le composé RhMnAs.
- Les composés ont un facteur d'anisotropiques  $A$  supérieur à la valeur critique ( $A=1$ ) séparant les matériaux isotropiques et anisotropes [15]. De ce fait, nous pouvons déduire que les composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn) sont anisotropes car  $A > 1$ .

- Le coefficient de poisson  $\nu$  proche de 0.26 ( $\nu \approx 0.26$ ) est le seuil de ductilité, et les valeurs inférieures à 0.26 ( $\nu < 0.26$ ) pour les matériaux fragiles. Nous notons que les quatre composés ont un coefficient de poisson supérieur à 0.26. Ce qui indique que les quatre composés sont ductiles.

**Tableau III.7-** Les propriétés mécaniques des composés RhYAs (Y=Cr, V, Ti et Mn) par l'approximation de Voigt, de Reuss et de Hill

Composés	Propriétés mécaniques	Voigt	Reuss	Hill
RhCrAs	Module de compression B (GPa)	145.303	145.303	145.303
	Module de cisaillement G (GPa)	32.237	26.466	29.351
	Module de Young E (GPa)	90.051	74.853	82.499
	facteur d'anisotropie A	2.508	2.508	2.508
	coefficient de Poisson $\nu$	0.397	0.414	0.405
	Rapport B/G	4.507	5.490	4.950
RhVAs	Module de compression B (GPa)	160.117	160.117	160.117
	Module de cisaillement G (GPa)	38.730	33.447	36.089
	Module de Young E (GPa)	107.522	93.810	100.701
	facteur d'anisotropie A	2.204	2.204	2.204
	coefficient de Poisson $\nu$	0.388	0.402	0.395
	Rapport B/G	4.134	4.787	4.437
RhTiAs	Module de compression B (GPa)	158.890	158.890	158.890
	Module de cisaillement G (GPa)	57.003	52.492	54.748
	Module de Young E (GPa)	152.743	141.855	147.322
	facteur d'anisotropie A	1.809	1.809	1.809
	coefficient de Poisson $\nu$	0.340	0.351	0.345
	Rapport B/G	2.787	3.027	2.902
RhMnAs	Module de compression B (GPa)	133.763	133.763	133.763
	Module de cisaillement G (GPa)	28.405	25.681	27.043
	Module de Young E (GPa)	79.582	72.409	76.007
	facteur d'anisotropie A	1.922	1.922	1.922
	coefficient de Poisson $\nu$	0.401	0.410	0.405
	Rapport B/G	4.709	5.209	4.946

**Références**

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B (1964) 864
- [2] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A (1965) 1133.
- [3] H. ABBASSA, « Contribution à l'étude des propriétés physico-chimiques des alliages d'Heusler », Université de Mostaganem, Thèse (2015).
- [4] R. Arras, « Structure électronique au voisinage des défauts de la magnétite et des interfaces Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/MgO(001) », Université Toulouse III-Paul Sabatier, Thèse Doctorat, (2010).
- [5] D. BENTAIFOUR, «Étude des propriétés électroniques et magnétiques de l'alliage Heusler quaternaire NiCoMnGe<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub>», Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem, Master,(2017).
- [6] H. Si Abdelkader, «Etude théorique des interfaces métal/céramique», Université Abou Bakr Blkaide-Tlemcen, Thèse Doctorat, (2012).
- [7] O. Maylis, «Etude par la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité des propriétés électroniques et magnétiques de complexes de fer. Application aux systèmes de types Catalase et Fer-Soufre», Université Joseph Fourier, Thèse Doctorat (2007)
- [8] M. C. Warren, G. J. Ackland, B. B. Karki, S. J. Clark, "Phase Transitions in Silicate Perovskites from First Principles", Mineral. Mag., 62, 585-598 (1998).
- [9] M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, , C. J. Pickard; P. J. Hasnip, S. J. Clark, M. C. Payne, "First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code", J. Phys.: Condens. Matter, 14, 2717-2743 (2002).
- [10] M. Mattesini, proposition et modélisation ab initio de nouveaux matériaux ultras-durs, thèse de Doctorat, Université de BordeauxI (2001).
- [11] M. D. Segall, R. Shah, C. J. Pickard, M. C. Payne, "Population analysis of plane-wave electronic structure calculations of bulk materials", Phys. Rev. B, 54, 16317-16320 (1996).
- [12] M. C. Payne, M. C. Teter, M. P. Allan, D. C. Arias, T. A. Joannopoulos, J. D. "Iterative Minimization Techniques for Ab Initio Total Energy Calculations: Molecular Dynamics and Conjugate Gradients", Rev. Mod. Phys., 64, 1045-1097 (1992).

- [13] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev. B 135188 (1976).
- [14] J. Ma, V. I. Hegde, K. Munira, Y. Xie, S. Keshavarz, D. T. Mildebrath, C. Wolverton, A. W. Ghosh, W. H. Butler, Phys. Rev. B 95, (2017) 02441.
- [15] D. MEKAM, «Propriétés électroniques, magnétiques et élastiques des nouveaux composés semi-Heusler XBaGa (X = Li, Na, K et Rb) », Université Djillali LIABES .SIDI BEL ABBES, Thèse Doctorat, (2012).
- [16] M.Born, K.Huange, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon, Oxford (1956).
- [17] W.Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik, Leipzig, Teubner (1928).
- [18] A. Reuss, Z. Angnew. Math Meth 9(1929) 55.
- [19] R. Hill, Proc. Phys. Soc. A 65 (1952) 349-54.

# ***Conclusion générale***

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude et la prédiction des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et mécaniques des alliages RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn). Pour cela, nous avons utilisé la méthode des pseudopotentiels PAW (la plus performante pour les systèmes magnétiques) avec l'approximation du gradient généralisée GGA celle paramétré par Perdew\_Burke Ernzerhof (PBE), mise en application par le code VASP (Vienna Ab initio Simulation Package).

Nous avons commencé par l'étude des propriétés structurales, les résultats obtenus montrent que les paramètres de mailles ( $a$ ) et les modules de compressibilité ( $B$ ) des composés RhYAs (Y=Ti, V, Cr, Mn) sont en bon accord avec les résultats disponibles dans la littérature. Nous avons étudié aussi la stabilité énergétique, les énergies de formation ( $E_f(\text{RhYAs})$ ) calculées sont négatives, ce qui implique que tous nos composés sont stables.

Ensuite, nous avons étudié les propriétés électroniques ; les densités d'états électroniques des composés RhYAs (Y = Cr, V, Mn) montrent un caractère semi-métallique où il y a un caractère métallique dans le spin majoritaire et un gap dans le spin minoritaire. Pour le composé RhTiAs, la densité d'états électronique présente un caractère semi-conducteur non-magnétique.

Puis, nous avons examiné les propriétés magnétiques, où nous avons déterminé les moments magnétiques totaux et partiels des composés RhYAs (Y = Ti, Cr, V, Mn). Nos résultats montrent que la principale contribution au moment magnétique total de chaque composé provient des atomes Y (Y = Cr, V, Mn) pour les composés RhYAs (Y = Cr, V, Mn). Pour le composé RhTiAs, nous avons trouvé des moments magnétiques nuls, ce qui confirme que le composé RhTiAs est un semi-conducteur non magnétique. Ces résultats confirment la règle de Slater-Pauling pour les semi-Heusler  $M_{\text{tot}} = N_V - 18$ .

Enfin, nous avons traité les propriétés mécaniques, les valeurs des constantes élastiques ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ ) confirment que les quatre composés sont mécaniquement stables. Les calculs des propriétés mécaniques montrent que les quatre composés RhYAs (Y = Ti, Cr, V, Mn) sont ductiles.

Comme perspectives, nous proposons d'effectuer une étude des propriétés optiques des composés RhYAs (Y = Ti, Cr, V, Mn).

**Résumé:**

Les semi-métaux ferromagnétiques, notamment les alliages Heusler et semi-Heusler, ont attiré l'attention pour leur application technologique dans le domaine de la spintronique. Dans ce travail, nous avons examiné les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et mécaniques des alliages semi-Heusler RhYAs ( $Y = \text{Cr, Ti, V, Mn}$ ). Pour cela, nous avons utilisé la méthode des pseudo-potentiels PAW basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).

**Mots-clés:** Calcul ab initio, Alliages semi-Heusler, Polarisation de spin, Structure électronique, propriétés mécaniques.

**Abstract:**

The half metallic ferromagnets, especially Heusler and half-Heusler alloys, have attracted attention for their technological application in the field of spintronic. In this work, we examined the structural, electronic, magnetic and mechanical properties of half-Heusler RhYAs ( $Y = \text{Cr, Ti, V, Mn}$ ) alloys. For this, we used the pseudo-potential PAW method based on the Density Functional Theory (DFT).

**Keywords:** Ab initio calculation, Half-Heusler alloys, Spin polarization, Electronic structure, Mechanical properties.

**ملخص:**

المعادن شبه المغناطيسية، ولا سيما سبائك Heusler ونصف Heusler ، لفتت الانتباه لتطبيقها التكنولوجي في مجال spintronics. في هذا العمل، قمنا بفحص الخصائص التركيبية و الالكترونية و المغناطيسية و الميكانيكية لسبائك نصف heusler RhYAs ( $Y=\text{Cr, Ti, V, Mn}$ ). لهذا استخدمنا طريقة الامكانات الزائفة (PAW) قائمة على نظرية دالة الكثافة (DFT).

**الكلمات المفتاحية:**

حساب Ab المبدئي، سبائك نصف heusle، استقطاب دوران، الهيكل الالكتروني، الخواص الميكانيكية.