

ETUDE AB-INITIO DES PROPRIETES STRUCTURALES, MAGNETIQUES DES ALLIAGES SEMI-HEUSLER DE XTISB (X=CO, NI, FE)

MILOUD IBRIR, SAADI BERRI AND SARRA BERRA

Université Med BOUDIAF M'sila, Faculté des Sciences, Département de Physique
Laboratoire de Physique des matériaux et ses Applications, M'Sila

Reçu le 13/05/2014 – Accepté le 24/06/2015

Résumé

Les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de trois composés de semi-Heusler : CoTiSb, NiTiSb et FeTiSb ont été calculées par la méthode des ondes planes augmentées (FP-LAPW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en utilisant le code de Wien2K. Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé (GGA(06)) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Les valeurs du paramètre de maille d'équilibre sont en accord avec les résultats expérimentaux disponibles. Les propriétés électroniques montrent que CoTiSb est un semi-conducteur, NiTiSb est un métal et FeTiSb est un semi-métalferromagnétique.

Mots clés : *ab-initio, DFT, FP-LAPW, semi-Heusler.*

Abstract

The structural, electronic and magnetic properties of three compounds of Half-Heusler of CoTiSb, NiTiSb and FeTiSb were calculated by the method (FP-LAPW) which is based on the DFT code WIEN2k. We used the approximation generalized gradient (GGA (06)) of the exchange (XC) and correlation potential to calculate structural, the electronic and magnetic properties. Structural properties obtained such that the lattice parameter are good agreement with experimental results available for the electronic properties and that it has magnetic: CoTiSb is a semiconductor, a metal and is NiTiSb FeTiSb is a ferromagnetic semi-metal.

Keywords: *ab-initio calculation, DFT, FP-LAPW, Half-Heusler.*

ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية حول الخصائص البنيوية، الالكترونية والمغناطيسية للمواد التي تدعي نصف سبائك هوسلر : **CoTiSb, NiTiSb, FeTiSb** بواسطة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا والتي تركز على نظرية كثافة الدالية **DFT** مدمجة ضمن برنامج **Wien2K** وقد استعملنا تقريب التدرج المعمم (**GGA**) لأجل حد كمون التبادل والترابط (**XC**) لحساب الخصائص البنيوية والالكترونية (عصابات الطاقة وكثافة الحالات) وكذلك الخصائص المغناطيسية.

الكلمات المفتاحية: حساب *ab-initio*، *DFT*، *LAPW*، أنصاف سبائك هوسلر.

I. INTRODUCTION

Les composés de semi-Heusler présentent un ferromagnétisme semi-métallique HMF (HalfMetallic Ferromagnétisme). Ils ont un gap énergétique dans une direction de spin au niveau de Fermi, alors que l'autre direction est fortement métallique. Ceci résulte en une spin-polarisation des électrons de conduction. Ainsi, les HMF ont un courant 100% spin-polarisé et peuvent être utilisés comme injecteurs de spin pour les mémoires magnétiques MRAM (MagneticRandom Access Memories) ainsi que d'autres dispositifs dont le fonctionnement dépend du spin comme les jonctions tunnel magnétiques [1].

Les propriétés physiques des solides tels que la structure électronique peuvent déterminer par plusieurs méthodes. Parmi les méthodes ab-initio les plus connues est les plus utilisables, on cite la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) utilisée pour le calcul des propriétés physiques des matériaux. Elle est restée de loin la plus utilisée et la plus efficace pendant plusieurs années. D'ailleurs, son avantage réside dans le fait qu'elle peut traiter un grand nombre d'atomes. Ce dernier atteint actuellement une dizaine de centaines et pourrait atteindre une centaine de milliers dans les prochaines années.

L'objectif du travail est l'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermodynamiques des alliages semi-Heusler de XTiSb (X=Co, Ni, Fe).

II. DÉTAILS DE CALCUL

Les calculs des propriétés structurales, électroniques et magnétiques sont effectués par le code Wien2K [2]. En utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées.

Pour le potentiel d'échange et de corrélation, nous avons utilisé les fonctions d'onde, les densités électroniques et le potentiel qui sont développés en combinaison harmoniques sphériques multipliés par les fonctions radiales autour des sites atomiques c'est-à-dire dans les sphères Muffin-tin avec un cutoff (rayon de coupure) $L_{max} = 10$, et en série de Fourier dans la région interstitielle avec un cutoff (rayon de coupure).

$R_{mt}^{min} * k_{max}$ (Où R_{mt}^{min} est le plus petit rayon de la sphère MT, k_{max} est le cutoff du vecteur d'onde pour les ondes planes).

Le calcul a été effectué de façon auto-cohérent en utilisant l'approximation GGA (06) pour le potentiel d'échange-corrélation de trois composés de semi-Heusler XYZ (X=Co, Ni, Fe ; Y=Ti et Z=Sb). Les atomes de X, Y et Z occupent les positions 4a (0.25,0.25, 0.25), 4c (0, 0, 0) et 4d (0.5, 0.5, 0.5) respectivement.

Les valeurs utilisées sont $R_{mt}^{min} * k_{max}=9$, $K_{point}=1000$, $R_{mt}=2.5$ pour Sb et 2.4 pour Ti, Co, Ni et Fe.

III. RESULTATS ET DISCUSSION

A. Propriétés structurales

Les données structurales à l'équilibre sont obtenues par ajustement de l'énergie totale en fonction du volume (à $T=0K$) à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [3, 4].

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

Où B, B' sont le module de compression à l'équilibre et sa dérivée par rapport à la pression, respectivement. V_0 est le volume de la maille élémentaire à l'équilibre. Le module de compression B est déterminé par la relation suivante :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (2)$$

L'équation de Murnaghan donne un bon fit de l'énergie en fonction du volume de la maille primitive.

Les figures (1, 2, 3) présentent la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour des composés semi-Heusler de XSbTi (X = Co, Ni, Fe) avec spin polarisé et sans spin polarisé.

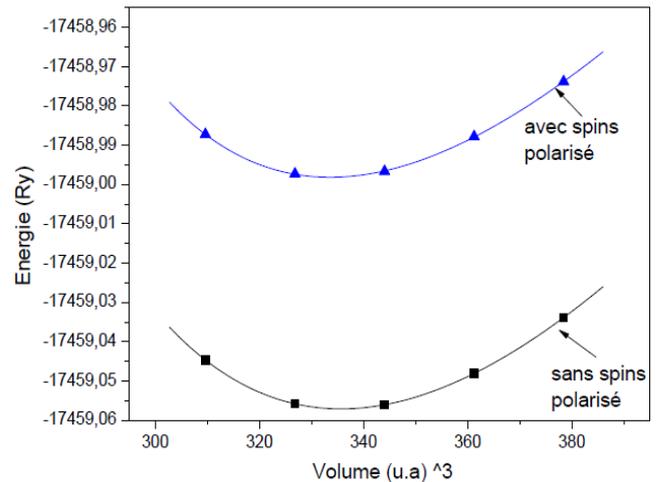


Fig. 1. L'énergie totale en fonction du volume du CoTiSb avec et sans spin polarisé.

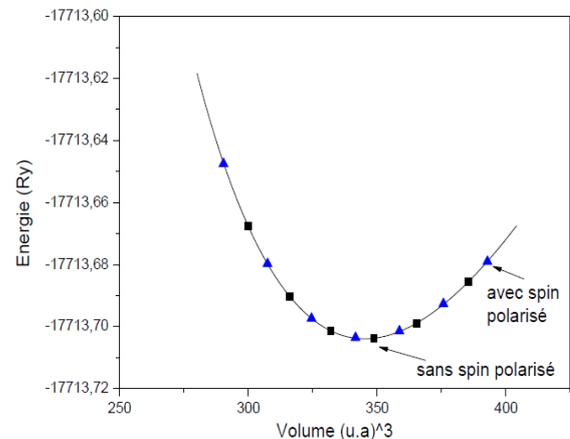


Fig.2. L'énergie totale en fonction du volume du NiTiSb avec et

sans spin polarisé.

Pour chaque courbe, nous remarquons que l'énergie présente un minimum pour un paramètre de maille donné. Ce dernier correspond au paramètre de maille optimisé (à $T=0$ K) qui peut être déterminé à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [3,4]. Ainsi que le module de compression et sa dérivée par rapport à la pression à l'équilibre.

On a dans le cas CoTiSb la phase la plus stable correspond à l'état non magnétique. La phase la plus stable de NiTiSb reste la même soit à l'état magnétique ou à l'état non-magnétique. La phase la plus stable de FeTiSb correspond à l'état magnétique. On peut remarquer aussi que les résultats obtenus dans le cas magnétique sont en excellents accord avec les données expérimentales [5, 6].

Les paramètres structuraux tels que le paramètre de maille, le module de compressibilité ainsi que l'énergie minimale obtenus lors des calculs sont présentés sur le tableau 1.

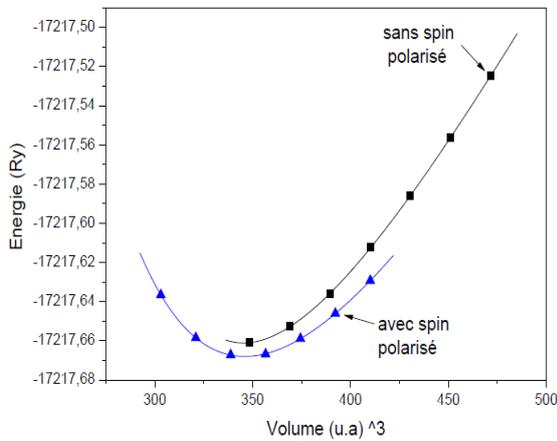


Fig. 3. L'énergie totale en fonction du volume du FeTiSb avec et sans spin polarisé.

TABLE I: PARAMETRE DU RESEAU (Å), MODULE DE COMPRESSIBILITE B (GPa), SA DERIVEE B' ET L'ENERGIE TOTALE MINIMALE E (Ry).

Param.	CoTiSb		NiTiSb		FeTiSb	
	Non-magnétique	magnétique	Non- magnétique	magnétique	Non- magnétique .	magnétique
a (Å)	5.838	5.826	5.893	5.892	5.893	5.897
	5.886[7]	5.886[7]	5.964[8]	5.964[8]	5.997[8]	5.997[8]
	5.884[9]	5.884[9]	5.87 [10]	5.87 [10]		
B(GPa)	155.60	155.30	139.51	138.34	177.00	132.53
B'	4.52	4.60	4.29	4.36	6.71	4.95
Emin (Ry)	-17459.0571	-17459.0570	-17713.7039	-17713.7037	-17217.6611	-17217.6680

C. Densité d'états (DOS)

Les densités d'états (DOS) totales des composés semi-Heusler de XTiSb (X=Co, Ni et Fe) sont calculées en utilisant l'approximation GGA (06). Les figures (7, 8, 9) représentent la densité d'états totale de XTiSb (X=Co, Ni et Fe).

Les figures 7 et 8 montrent qu'il existe une symétrie entre spin up (↑) et spin down (↓) pour les composés de semi-Heusler de XTiSb (X=Co, Ni).

B. Structure de bandes d'énergie

La figure 4 montre les courbes de dispersion d'énergie de CoTiSb qui présente un gap d'énergie (indirect) de 0,95 eV, ce gap d'énergie se produit entre le haut de la bande de valence au point Γ et le bas de la bande de conduction au point X. Les courbes de la structure de bande de CoTiSb avec spin polarisé (spin "up" et "down") sont semblables, ce qui confirme que notre composé CoTiSb est un semi-conducteur.

Dans la figure 5, un chevauchement a été constaté entre les bandes d'énergie de structure et le niveau de Fermi E_F . Les courbes de la structure de bande de NiTiSb avec spin polarisé (spin "up" et "down") sont semblables. Ce chevauchement confirme que le composé NiTiSb est un métal.

Dans la figure 6 (a) et (b) la structure de bande de FeTiSb avec spin polarisé (spin "up" et "down") ne sont pas semblables.

Dans la figure (6 (a)) on n'observe que les bandes obtenues présentent un gap d'énergie 0.9 eV alors que dans la figure (6 (b)) un chevauchement a été constaté entre les bandes d'énergie de structure et le niveau de Fermi E_F . Cette différence entre les deux spins affirme que le composé FeTiSb est un semi-métal.

Le composé FeTiSb a un caractère magnétique, ceci est dû à l'asymétrie des états de spins "up" (↑) et "down" (↓) comme le montre la figure 9, on note la présence d'un décalage des états de spins "up" (↑) et "down" (↓) dans l'intervalle [-2.5, 0.5] eV.

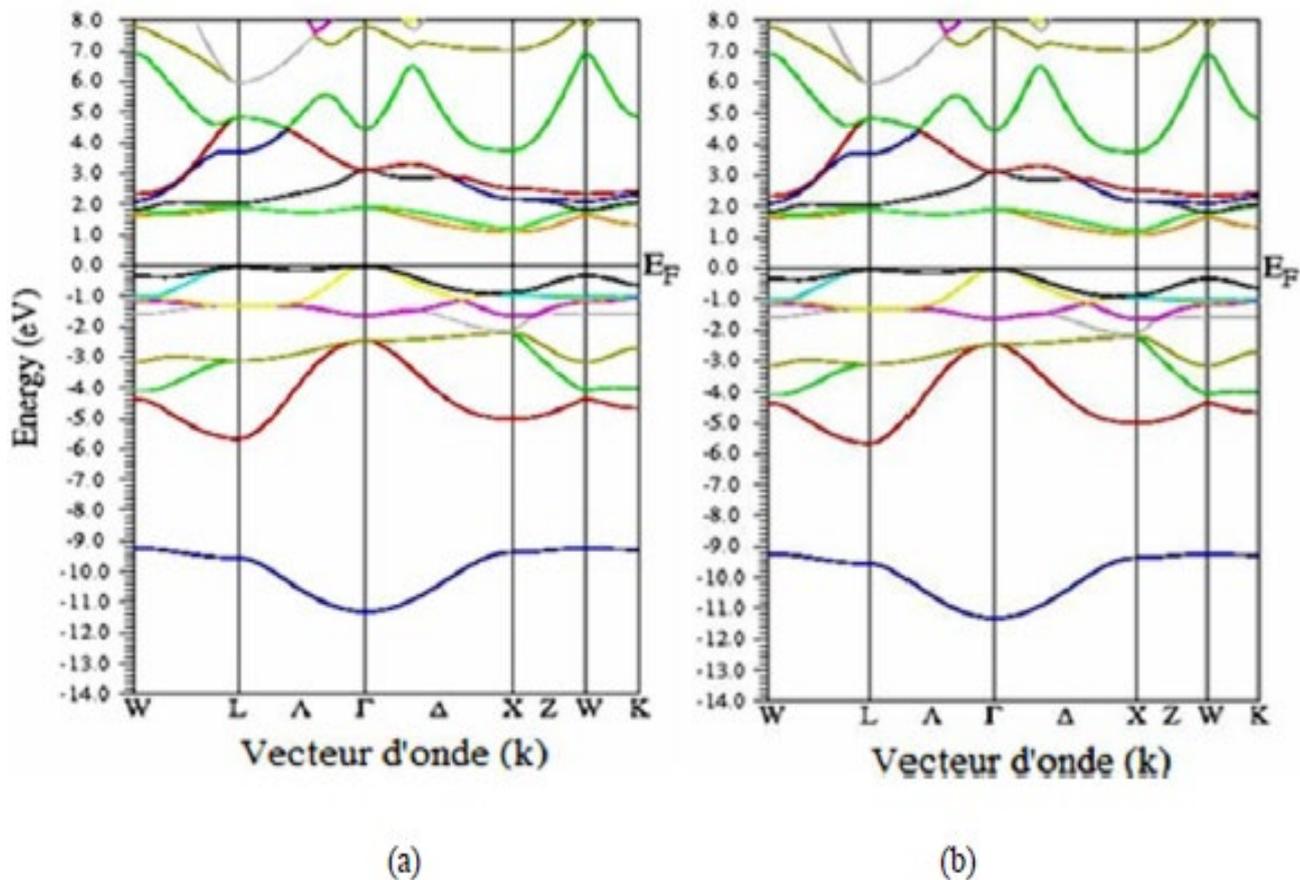


Fig. 4. La structure de bande de CoTiSb avec spin polarisé (a) "up" (↑) et (b) "down".

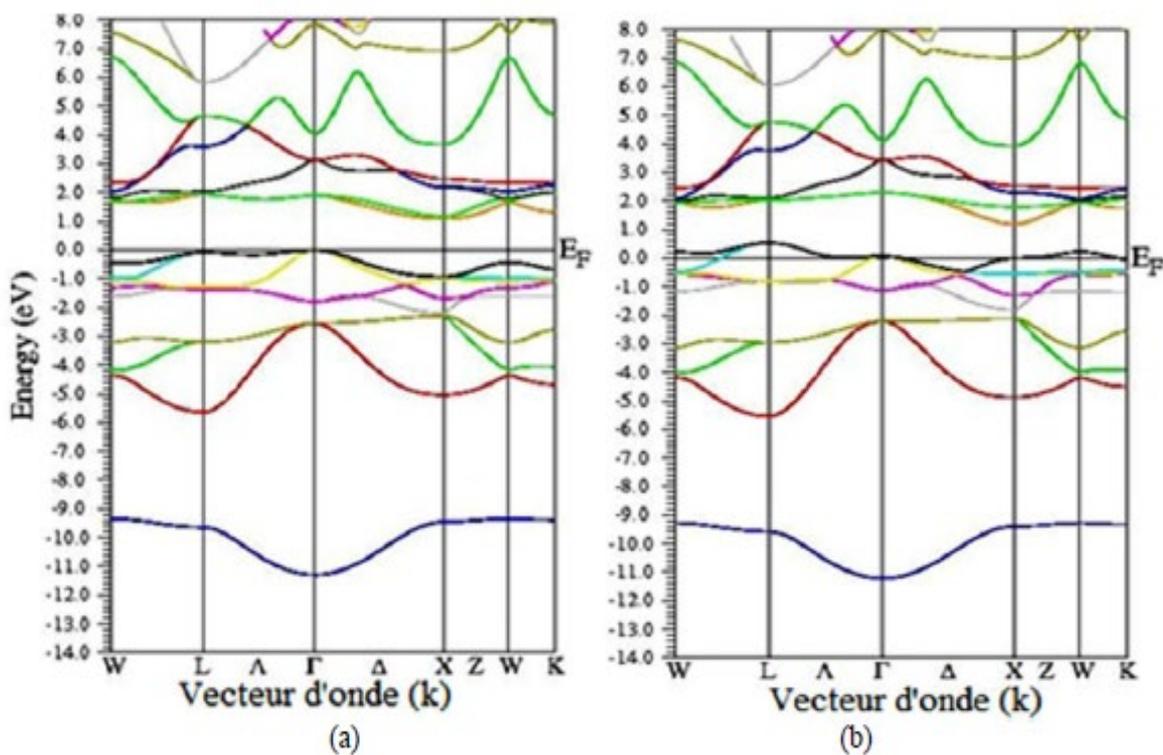


Fig.6. La structure de bande de FeTiSb avec spin polarisé (a) "up" (↑) et (b) "down".

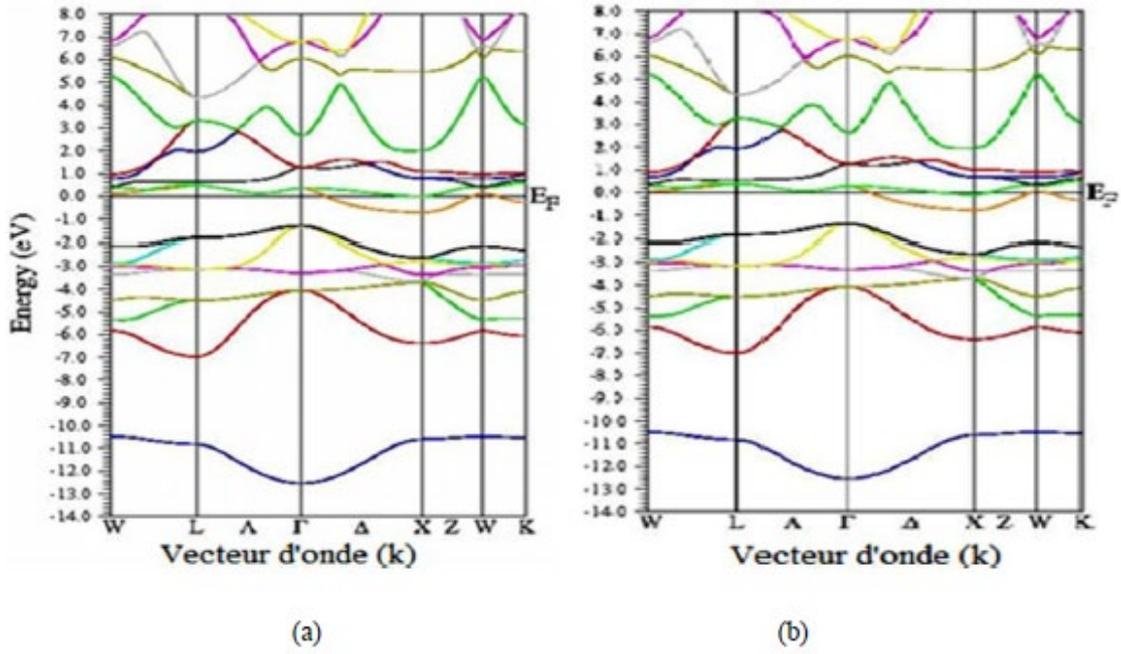


Fig.5. La structure de bande de NiTiSb avec spin polarisé (a) "up" (↑) et (b) "down".

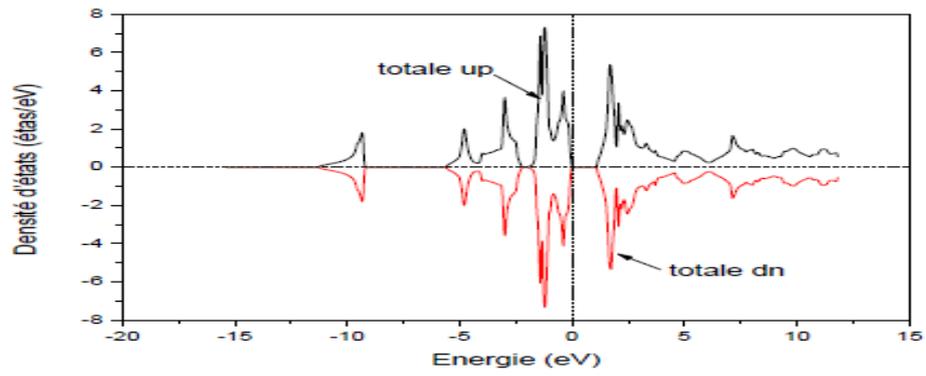


Fig. 7. La densité d'états totale de CoTiSb avec spin polarisé "up" (↑) et

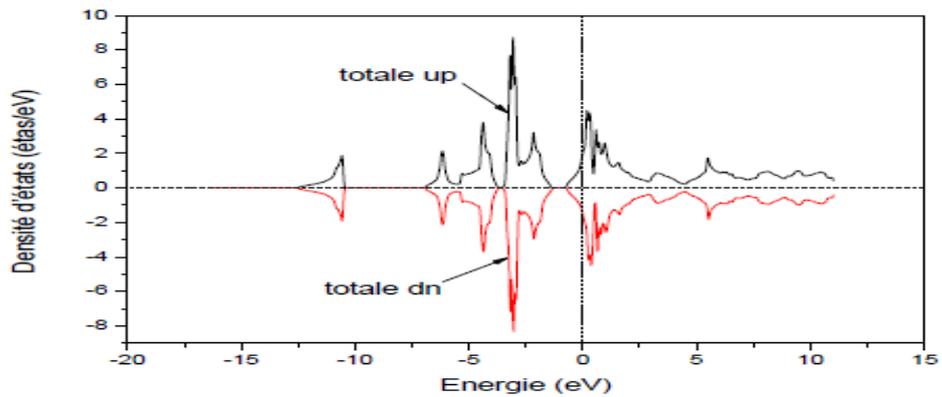


Fig. 8. La densité d'états totale de NiTiSb avec spin polarisé "up" (↑) et

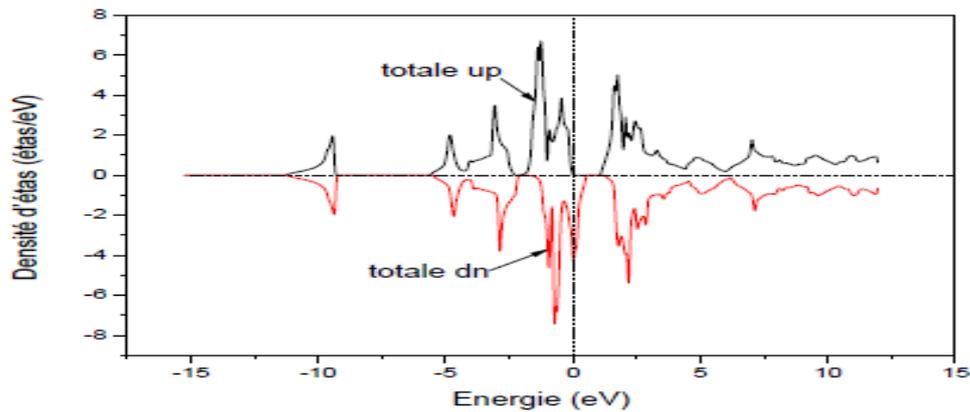


Fig. 9. La densité d'états totale de FeTiSb avec spin polarisé "up" (↑) et "down"

IV. CONCLUSION

L'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques des composés Semi-Heusler de XTiSb (X=Co, Ni, Fe) est indispensable pour les relations qui existent entre les structures (la façon dont s'organisent les éléments constituant un matériau) et les propriétés des matériaux. Dans notre étude, nous avons appliqué le code de calcul ab initio WIEN2k, basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), on a utilisé la méthode de (FP-LAPW) Pour étudier les propriétés structurales, la stabilité des phases, les propriétés électroniques et les propriétés magnétiques.

Les principaux résultats obtenus sont :

1- les propriétés structurales montrent que :

- Les valeurs de paramètre de maille (a) dans l'état d'équilibre sont en bon accord avec les données expérimentales.

- La phase la plus stable pour les deux composés CoTiSb et NiTiSb est à l'état non-magnétique.

- FeTiSb se présente dans l'état magnétique.

2- les propriétés électroniques et magnétiques:

- Nos calculs de la structure électronique et DOS montrent que:

- NiTiSb est un métal.

- CoTiSb est un semi-conducteur.

- FeTiSb est un semi-métal ferromagnétique avec un moment magnétique de $0.912 \mu_B$ de l'atome de fer.

REFERENCES

- [1] K. Benabadi, Mémoire de Magister, (A B B) Tlemcen, (2009).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave+local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria) (2001).
- [3] F. D. Murnaghan ; Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 244 (1944).
- [4] V.G. Tyuterev et N. Vast ; Comp. Mat. Sc. Vol. 38 350 (2006).

- [5] M.P. Ghimire, Sandeep, T.P. Sinhad et R.K. Thapac ; J. A. Comp. 509 9742– 9752(2011).

- [6] I. Galanakis , P. H. Dederichs et N. Papanikolaou ; Phys. Rev. B 66 134428 (2002)

- [7] S. E. Kulkova, S. V. Eremeev, T. Kakeshita, S. S. Kulkov et G. E. Rudenski ; Mat. Tran 47 (2006) 599–606

- [8] J. Tobola et J. Pierre ; J. A. Comp. 296 (2000) 243–252

- [9] I. Galanakis , P. H. Dederichs et N. Papanikolaou ; Phys. Rev. B 66 (2002) 174429-1–174429-9

- [10] M.P. Ghimire, Sandeep, T.P. Sinhad et R.K. Thapac ; J. A. Comp. 509 (2011) 9742– 9752.