

N° d'ordre :

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



Centre Universitaire Belhadj  
Bouchaib d'Ain-Temouchent

# ***Mémoire DE Master***

*Présentée par*

*Mohammedi Assia*

*Spécialité : Physique*

*Option : Physique des matériaux*

*Intitulée*

*Etude de Ferromagnétisme dans les Alliages  
Heuslers à Base de Mn<sub>2</sub>*

*Soutenue le 25 / 06 /2019*

*Devant le jury composé de :*

*Président : Abd'Essalam Boucif Pr Centre Universitaire Ain temouchent*

*Examineurs : Hebri Salem MCB Centre Universitaire Ain temouchent*

*Dine el Hannani Mohammed MCB Centre Universitaire Ain temouchent*

*Encadreur : Bensaid Djillali MCA Centre Universitaire Ain temouchent*

*Année universitaire :2018/2019*

## RÉSUMÉ :

Ce travail repose sur l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétique de l'alliage heusler  $\text{Mn}_2\text{PtCo}$ , en appliquant les méthodes ab-initio basant sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) avec utilisation l'approximation de gradient généralisé GGA, en l'occurrence la méthode de calcul : FP-LAPW incorporée dans le code Wien2k. On a traité la stabilité structurale plus on a déterminé le paramètre d'équilibre, le module de compressibilité et sa dérivée. L'analyse de la densité d'état et le calcul de la structure de bande se faite pour la structure  $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$  dans l'ordre ferromagnétique car elle est plus stable. On a calculé le moment magnétique et la température de curie. Une cohérence a été montrée entre nos résultats et ceux d'autres calculs théoriques.

**Mots clés:** FP-LAPW, les alliages Heusler, Demi-Métallique

## ABSTRACT:

This work deals with the study of the structural, electronic and magnetic properties of the Heusler alloy  $\text{Mn}_2\text{PtCo}$ , by applying the ab-initio methods based on density functional theory (DFT) using the approximation of generalized gradient GGA, in this case the calculation method: FP-LAPW incorporated in the Wien2k code. We treated the structural stability and the more we have determined the equilibrium parameter, the bulk modulus and its derivative. The analysis of the density of state and the calculation of the band structure is done for the  $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$  structure in the ferromagnetic order because it is more stable. The magnetic moment and the Curie temperature were calculated. A consistency has been shown between our results and those of other theoretical calculations.

**Keywords:** FP-LAPW, Heusler Alloys, Half-metallic

## ملخص :

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية للخصائص البنيوية، الإلكترونية و المغناطيسية  $\text{Mn}_2\text{PtCo}$  للمركب بتطبيق أساليب ab-initio على أساس نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستخدام تقريب التدرج المعمم GGA، في هذه الحالة طريقة الحساب: FP-LAPW مدمجة في شفرة Wien2k. تمت معالجة الاستقرار الهيكلي كلما تم تحديد معامل الاتزان، وتم تحديد معامل الانضغاط ومشتقاته. تم تحليل كثافة الحالة وحساب بنية النطاق لبنية  $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$  بالترتيب المغنطيسي الفيرومغنطيسي لأنها أكثر استقرارًا. تم حساب العزم المغناطيسي ودرجة حرارة كوري. لقد ظهر اتساق بين نتائجنا ونتائج الحسابات النظرية الأخرى. الكلمات المفتاحية: FP-LAPW، خلائط هوسلر، شبه معدني