

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE DE MASTER
SPECIALITE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE DE LA MATIERE DE DIMENSIONALITE
REDUITE

Présenté par :
Katia HAMMAR

Thème

*Etude «ab initio» des propriétés structurales, électroniques
et magnétiques des couches d'alliages FePt L1₀*

Devant le jury d'examen composé de :

| | | | |
|----------------|-------------------------|------------|------------|
| AL KACHAI Aziz | Maitre de Conférences A | U.M.M.T.O. | Président |
| MESSAD Leila | Maitre de Conférences B | U.M.M.T.O. | Rapporteur |
| BOUARAB Saïd | Professeur | U.M.M.T.O. | Examineur |

Soutenue le : 24/09/2014

*Je dédie ce travail
A mes parents
A mon frère
A mes soeurs*

Katia HAMMAR

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

Je tiens à remercier vivement, mademoiselle Leila MESSAD pour m'avoir fait confiance tout au long de mon travail. Sa patience et ses conseils m'ont permis de mener à bien mon travail.

Je remercie également monsieur Aziz AL KACHAI enseignant à l'Université de Tizi-Ouzou, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le Jury de cette thèse.

Je remercie également monsieur Saïd BOUARAB professeur à l'Université de Tizi-Ouzou, de m'avoir fait l'honneur d'être parmi le Jury de cette thèse.

Je ne pourrais finir sans remercier tous les membres du LPCQ ainsi que tous les membres de ma famille et mes amis : Anis, Aomar, Boussad, Khaled, Lamia, Louiza, Menad, Safia, Yacine, pour leur aide, encouragement et surtout soutien.

Table des matières

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| Table des matières | i |
| Liste des figures | iv |
| Liste des tableaux | vi |
| Introduction générale | 1 |
| 1 Propriétés de l’alliage $FePt$ | 3 |
| 1.1 Le système $FePt$ | 3 |
| 1.2 La structure $L1_0$ | 4 |
| 1.3 Magnétisme de l’alliage $FePt$ | 7 |
| 2 Code de calcul et concepts fondamentaux de la DFT | 8 |
| 2.1 Equation de Schrödinger | 8 |
| 2.2 Approximation de Born-Oppenheimer | 9 |
| 2.3 Approximation de Hartree | 9 |
| 2.4 Approximation de Hartree-Fock | 10 |
| 2.5 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) | 10 |
| 2.5.1 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn | 11 |
| 2.5.2 Les équations de Kohn-Sham | 11 |
| 2.6 Les approximations de la fonctionnelle d’échange et de corrélacion | 13 |
| 2.6.1 Approximation de la densité locale LDA (Local Den- sity Approximation) | 13 |
| 2.6.2 Approximation du Gradient Généralisé GGA (Gen- eralized Gradient Approximation) | 14 |
| 2.7 Le code de calcul VASP | 14 |
| 2.7.1 Résolution des équations de Kohn Sham | 15 |

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.7.2 | Ondes planes augmentées <i>PAW</i> | 16 |
| 2.7.3 | Les pseudopotentiels | 17 |
| 3 | Résultats et discussions | 19 |
| 3.1 | Etude préliminaire | 19 |
| 3.1.1 | Variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure E_{cut} | 19 |
| 3.1.2 | Maillage de la première zone de Brillouin | 20 |
| 3.2 | Propriétés de l'alliage FePt | 21 |
| 3.2.1 | Structure géométrique | 21 |
| 3.2.2 | Les densités d'états électroniques | 22 |
| 3.2.3 | Moments magnétiques | 25 |
| 3.3 | Propriétés des couches de l'alliage FePt | 25 |
| 3.3.1 | Relaxation des plans atomiques | 26 |
| 3.3.2 | Les densités d'états électroniques | 29 |
| 3.3.3 | Moments magnétiques | 33 |
| | Conclusion générale | 36 |
| | Bibliographie | 38 |

Table des figures

| | | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1 | <i>Diagramme de phases de l'alliage FePt massif.</i> | 4 |
| 1.2 | <i>Les trois variantes de la structure $L1_0$.</i> | 6 |
| 1.3 | <i>Maille tétragonale à faces centrées et maille primitive quadratique</i> | 6 |
| 2.1 | <i>Schéma de résolution du cycle auto-cohérent sur un calcul de convergence.</i> | 16 |
| 2.2 | <i>Visualisation schématique des principaux choix d'implémentation dans la DFT</i> | 18 |
| 3.1 | <i>Variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure : (a) Paramagnétique, (b) Ferromagnétique.</i> | 20 |
| 3.2 | <i>Variation de l'énergie totale en fonction du maillage.</i> | 21 |
| 3.3 | <i>Variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille tétragonal : (a) Paramagnétique, (b) Ferromagnétique.</i> | 22 |
| 3.4 | <i>Densité d'état partielle de fer en volume.</i> | 23 |
| 3.5 | <i>Densités d'états partielles de l'alliage FePt : (a) paramagnétique, (b) ferromagnétique.</i> | 24 |
| 3.6 | <i>Empilement des plans de fer et de platine (direction (001)).</i> | 26 |
| 3.7 | <i>Slab symétrique de fer et de platine (direction (001)).</i> | 27 |
| 3.8 | <i>Densités d'états partielles, neuf plans atomiques, fer en surface.</i> | 29 |
| 3.9 | <i>Densités d'états partielles, neuf plans atomiques, platine en surface.</i> | 30 |
| 3.10 | <i>Densités d'états partielles, onze plans atomiques, fer en surface.</i> | 31 |
| 3.11 | <i>Densités d'états partielles, onze plans atomiques, platine en surface.</i> | 32 |
| 3.12 | <i>Densités d'états partielles, neuf et onze plans atomiques.</i> | 33 |

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.13 | <i>Variation du moment magnétique en fonction du numéro de plan de fer.</i> | 34 |
| 3.14 | <i>Slab avec les moments magnétiques sur les atomes de fer (échelle 1).</i> | 35 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.1 | Comparaison des paramètres d'équilibres. | 21 |
| 3.2 | Comparaison des moments magnétique. | 25 |
| 3.3 | Relaxation des distances inter-plans, neufs plans atomiques, fer en surface. | 27 |
| 3.4 | Relaxation des distances inter-plans, neuf plans atomiques, platine en surface. | 27 |
| 3.5 | Relaxation des distances inter-plans, onze plans atomiques, fer en surface. | 27 |
| 3.6 | Relaxation des distances inter-plans, onze plans atomiques, platine en surface. | 28 |
| 3.7 | Energies de surfaces. | 28 |
| 3.8 | Moment magnétique total. | 34 |

Introduction générale

Cela fait plus d'un siècle que des scientifiques se sont intéressés à l'étude des matériaux qui présentent une anisotropie des propriétés magnétiques. Dès 1896, Pierre Weiss [1] publiait les résultats de ses recherches sur l'anisotropie de l'aimantation de la magnétite cristallisée. Mais c'est seulement vers les années trente qu'un nombre considérable d'études [2, 3, 4, 5, 6, 7] ont été consacrées à l'anisotropie magnétique, à fin de comprendre l'origine de cette propriété physique intrinsèque aux matériaux.

Plus récemment, du fait du développement des techniques d'élaborations et de caractérisation de matériaux en couches, de tels types de matériaux ont suscité un regain d'intérêt pour des applications dans les secteurs du stockage de l'information [8, 9, 10], et de la fabrication d'aimants permanents performants.

Parmi les alliages de la famille (Mn, Fe, Co), (Ni, Pd, Pt), le FePt s'illustre par ses excellentes propriétés magnétiques et structurales. Dans sa phase cristallographiquement ordonnée, il présente une très forte anisotropie magnétocristalline de $[6.6-10] \times 10^6 J/m^3$ [11], qui est de l'ordre de grandeur de celle obtenue dans les alliages R-M (R = terre rare - M = Fe, Co) les plus anisotropes.

L'ensemble de ces propriétés le place parmi les matériaux magnétiques durs les plus performants. Seul le coût excessif du platine explique qu'il n'ait pas trouvé d'applications à ce jour. Cependant, dans les disques durs supports d'enregistrement, la quantité de matière en jeu est très faible, si bien que le coût des matériaux ne joue pas un rôle important, c'est pourquoi le FePt est considéré comme l'un des candidats les plus prometteurs pour le développement de supports d'enregistrement de haute densité. C'est ce qui explique le nombre important d'études sur les propriétés de cet alliage en couches ultra minces. Beaucoup de travaux ont été publiés depuis

le développement de la fabrication de structures artificielles en couches minces [12, 13, 14, 15, 16, 17].

Dans le cadre de ce travail de mémoire de Master, notre étude portera sur le calcul de quelques propriétés (structurales, électroniques et magnétiques) de cet alliage en couches minces. Le calcul a été fait par simulation ab-initio à l'aide du code VASP (Vienna ab initio Simulation Package).

Ce manuscrit est structuré de la manière suivante :

Le premier chapitre est consacré à la description du diagramme de phases du système FePt, en particulier la configuration ordonnée de structure $L1_0$, ainsi que ses propriétés structurales et magnétiques.

Un aperçu sur les concepts fondamentaux des calculs ab-initio, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT , et la mise en œuvre du code VASP sera présenté dans le deuxième chapitre.

Le troisième chapitre regroupe tous les résultats de nos calculs ; il est divisé en trois parties : la première traite les détails de calculs, entre autres énergie de coupure et maillage de la zone de Brillouin. La deuxième et la troisième partie portent sur les structures géométriques, les moments magnétiques et les densités d'états électroniques en volume, puis en surface pour les configurations paramagnétique et ferromagnétique.

Chapitre 1

Propriétés de l'alliage $FePt$

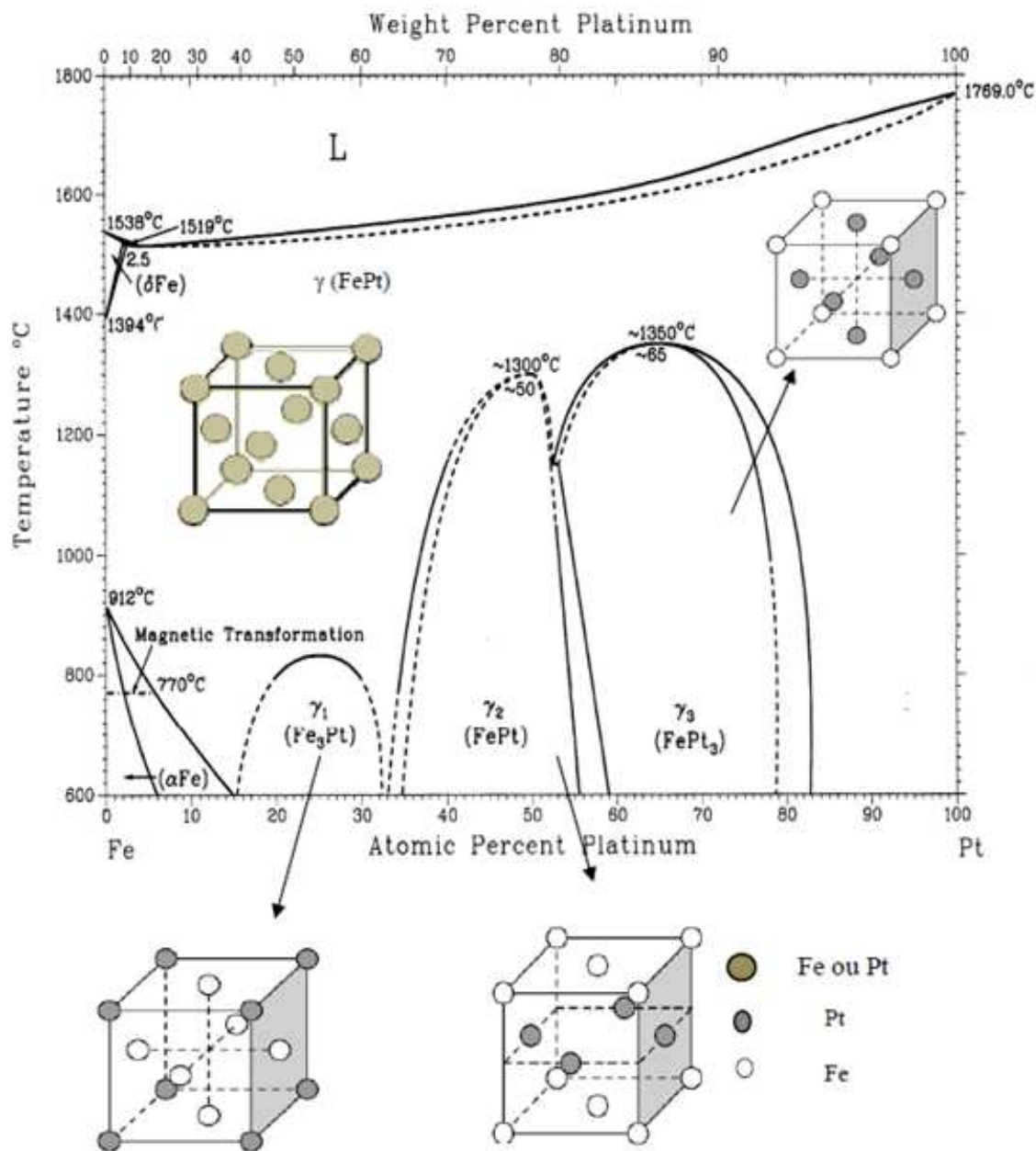
L'étude de l'alliage $Fe - Pt$ est d'un grand intérêt pour ses propriétés magnétiques. La forte anisotropie de la phase ordonnée du système équiatomique $FePt$ dans le cas des couches minces ou des multicouches a attiré l'attention de nombreuses équipes en raison des applications possibles pour l'enregistrement magnétique [10] ou pour la fabrication d'aimants permanents [18].

1.1 Le système $FePt$

Selon la température et la composition x , l'alliage Fe_xPt_{1-x} se présente sous plusieurs phases (1.1). On peut distinguer, d'une part la phase dite chimiquement désordonnée et, d'autre part, les phases chimiquement ordonnées $L1_0$ et $L1_2$ (figure 1.1).

A haute température : le système $FePt$ se présente sous une solution solide (Fe, Pt) désordonnée de structure cristallographique cubique faces centrées où chaque site atomique est aléatoirement occupé par un atome de platine ou de fer ; cette phase est chimiquement désordonnée et stable thermodynamiquement.

À température ambiante : le diagramme de phase [19, 20] donne principalement trois phases ordonnées : la phase tétragonale centrée $L1_0$, dont la composition est proche de $Fe_{50}Pt_{50}$, et les phases cubiques à faces centrées $L1_2$, avec les deux compositions moyennes $Fe_{75}Pt_{25}$ et $Fe_{25}Pt_{75}$.


 FIGURE 1.1 – Diagramme de phases de l'alliage *FePt* massif.

1.2 La structure L_{10}

La majorité des alliages présentant une structure de type L_{10} , sont composés d'éléments à base de métaux de transition, avec des énergies de sur-

face qui sont proches. Une telle situation est compatible avec l'alternance des plans d'atomes différents, caractéristique de la structure $L1_0$. Dans le cas du Fe et du Pt, cette énergie est la même dont 2.475 J/m^2 à 0K [21].

Le rapport entre les rayons atomiques des atomes qui composent la structure $L1_0$ variant de plus de 10%, le rapport c/a est donc nécessairement inférieur à 1 en utilisant la maille conventionnelle (ou en utilisant, comme c'est souvent le cas, la maille primitive composée uniquement de deux atomes).

Le passage de l'état désordonné *cfc* à l'état ordonné $L1_0$ s'accompagne d'une brisure de la symétrie de rotation de la structure *cfc*, qui voit ses trois axes de symétrie d'ordre quatre se réduire à un seul, après transformation en une structure $L1_0$. L'orientation de cet axe unique peut donc prendre une des directions quelconques $[001]$, $[010]$ ou $[100]$ de la structure *cfc* de départ. De ce fait, il existe au total trois variantes possibles pour la structure $L1_0$ voir (figure la 1.2).

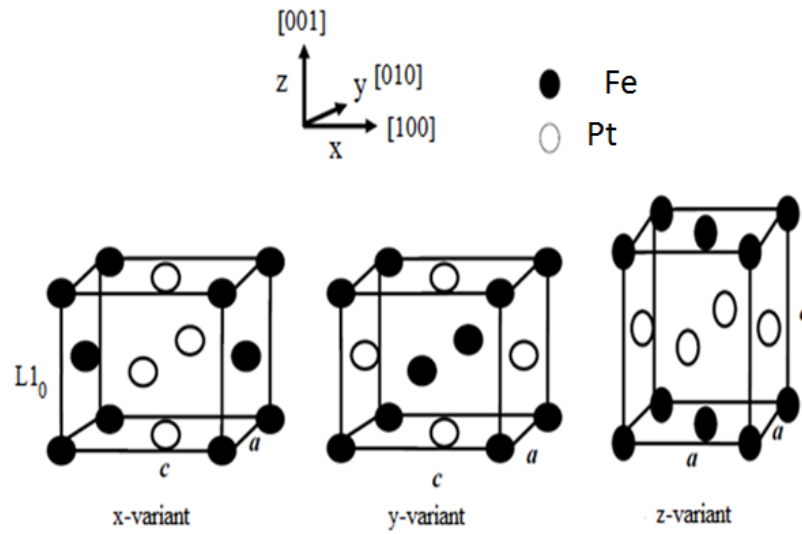


FIGURE 1.2 – Les trois variantes de la structure $L1_0$

La maille cristalllographique de la structure $L1_0$, pour l'alliage $Fe_{50}Pt_{50}$ parfaitement ordonné, peut être décrite comme la superposition de deux sous-réseaux : un sous-réseau (1) correspondant aux plans de fer pur et le sous-réseau (2) correspondant aux plans de platine pur (figure 1.3).

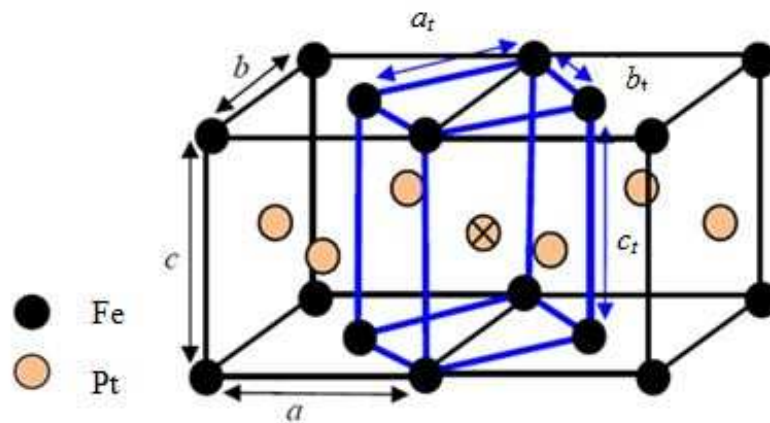


FIGURE 1.3 – Maille tétragonale à faces centrées et maille primitive quadratique

$$\vec{a}_t = \frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}, \vec{b}_t = \frac{\vec{a} - \vec{b}}{2}, \vec{c}_t = \vec{c} \qquad a_t = b_t = \frac{a\sqrt{2}}{2}, c_t = c$$

où $(\vec{a}_t, \vec{b}_t, \vec{c}_t)$ et $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ sont les vecteurs de base des mailles primitive et conventionnelle respectivement.

Dans la structure $L1_0$, chaque atome est entouré par quatre atomes de la même nature et huit atomes de natures différentes (figure 1.3). Cette propriété joue un rôle très important sur le magnétisme des composés pouvant présenter une telle structure.

1.3 Magnétisme de l'alliage *FePt*

L'un des intérêts, qui ont motivé le nombre important d'études sur le système *FePt*, est sans nul doute la grande diversité des états magnétiques possibles dans les différentes phases.

L'anisotropie magnétique uniaxiale de la phase $L1_0$ de l'alliage *FePt* est d'origine magnétocristalline, liée au couplage spin-orbite qui tend à orienter chaque moment magnétique, selon une direction privilégiée du fait de la symétrie particulière du réseau cristallin (alternance de plan atomique pur de fer et de platine) [22].

A cela, s'ajoutent les liaisons dans les plans purs qui sont homochimiques (*Fe - Fe* et *Pt - Pt*) alors, qu'entre plans purs, elles sont hétérochimiques (*Fe - Pt*).

La valeur de la constante d'anisotropie est très élevées (d'environ 7×10^7 erg/cm³[23, 24, 25]).

Dans la phase $L1_0$ du *FePt*, les atomes de *Pt* possèdent également un moment magnétique induit qui contribue au moment magnétique total. Les propriétés magnétiques de l'alliage, telles que l'aimantation, la constante d'anisotropie uniaxiale et la température de Curie, dépendent de la composition chimique de l'alliage et de l'ordre chimique.

Chapitre 2

Code de calcul et concepts fondamentaux de la DFT

Pour modéliser un système quantique formé de N particules en interaction coulombienne, on utilise des méthodes et des approches théoriques basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger ; pour cela, on a des méthodes semi-empiriques qui nécessitent l'utilisation des données numériques empruntées aux mesures expérimentales, et des méthodes *ab initio* basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger, utilisées sans introduire des variables ajustables.

Ces méthodes permettent de déterminer les grandeurs physiques et chimiques d'un système.

2.1 Equation de Schrödinger

Les états propres et les énergies propres d'un système à N corps en interaction sont déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H_T \Psi(r_i, R_\alpha) = E \Psi(r_i, R_\alpha), \quad (2.1)$$

où r_i et R_α sont, respectivement les positions dans l'espace des électrons et des noyaux. H_T est l'opérateur hamiltonien définissant la somme de toutes les contributions cinétiques et les interactions coulombiennes.

$$H_T = T_e + T_n + V_{e-n} + V_{e-e} + V_{n-n}. \quad (2.2)$$

$$H_T = \sum_i -\Delta_i + \sum_\alpha \Delta_\alpha + \sum_{i,j} \frac{1}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha}{|r_i - R_\alpha|} + \sum_{\alpha,\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (2.3)$$

où T_e et T_n sont, respectivement, les énergies cinétiques des électrons et des noyaux, V_{e-e} , V_{e-n} et V_{n-n} les énergies d'interaction électrostatique d'origine coulombienne entre électron-électron, électron-noyau et noyau-noyau, $-E$ est l'énergie propre du système.

$\Psi(r_i, R_\alpha)$ est la fonction d'onde n .

La résolution de l'équation (2.1) admet une solution analytique que pour le cas simple (atome d'hydrogène); cependant, pour N corps, des approximations sont envisageables.

2.2 Approximation de Born-Oppenheimer

Vu que les électrons ont une masse très faible devant celle des noyaux ($m_e/m_p = 1/1836$) et une vitesse largement plus grande, la résolution des équations se fait en considérant les noyaux immobiles.

Cette approximation [26], dite adiabatique, a pour but de simplifier l'équation (2.1); elle consiste à séparer, dans la fonction d'onde totale, la partie électronique (les électrons) de la partie nucléaire (les noyaux).

$$\Psi(r, R_\alpha) = \Psi_n(R_\alpha) \Psi_e(r, R_\alpha) \quad (2.4)$$

L'hamiltonien total peut alors se décomposer en deux parties, un hamiltonien effectif correspondant aux ions, et un hamiltonien effectif correspondant aux électrons :

$$H_{total} = H_{electrons} + H_{ions} \quad (2.5)$$

Cette approximation adiabatique réduit le problème à plusieurs corps; cependant les électrons ne se déplacent pas indépendamment les uns des autres car il existe de fortes interactions électrons-électrons. Donc, une autre approximation est nécessaire.

2.3 Approximation de Hartree

Hartree [27] fût le premier qui a proposé l'hypothèse du champ moyen; chaque électron évolue dans un potentiel effectif généré par les noyaux et

les autres électrons. La fonction d'onde totale $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ est remplacée par le produit direct de fonctions d'onde à une particule.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\dots\psi_N(r_N). \quad (2.6)$$

Fock [28] a montré que la fonction d'onde de Hartree est incompatible avec le principe d'exclusion de Pauli car elle n'est pas symétrique.

2.4 Approximation de Hartree-Fock

La méthode de Hartree-Fock utilise l'approximation de champ moyen afin d'exprimer la corrélation électronique non-dynamique; la méthode de Hartree-Fock exprime la fonction d'onde poly-électronique sous forme d'un déterminant de Slater [29].

$$\Psi(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_N(r_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_1(r_N) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

Cette approximation conduit à de bons résultats, en physique moléculaire. Notamment dans le cas des solides, le terme d'échange provenant du mouvement corrélé des électrons dû à l'antisymétrie de la fonction d'onde rend la résolution des équations de Hartree-Fock très difficile.

2.5 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

L'approche de la DFT (Density Functional Theory) permet d'atteindre une bonne précision de calcul, pour une taille réaliste du système. L'idée principale de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est que l'énergie d'un système d'électrons peut être exprimée en fonction de la densité électronique $\rho(r)$. Pour un système de N électrons, $\rho(r)$ correspond à la densité électronique au point de l'espace r .

La DFT est basée sur deux théorèmes fondamentaux introduits par Hohenberg et Kohn et ensuite étendus par Kohn et Sham [30, 31].

2.5.1 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn

Le premier théorème repose sur le fait que l'énergie E de l'état fondamental d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur V_{ext} est une fonctionnelle unique de la densité électronique $\rho(r)$ et que l'énergie de l'état fondamental s'écrit :

$$E = E[\rho(r)] \quad (2.8)$$

Le second théorème de Hohenberg et Kohn [30] énonce que la densité qui minimise $E[\rho(r)]$ est la densité exacte de l'état fondamental.

2.5.2 Les équations de Kohn-Sham

L'approche de Kohn-Sham [31] réalise une correspondance exacte entre la densité électronique et l'énergie de l'état fondamental d'un système constitué de fermions non interactifs placés dans un potentiel effectif $V_s(r)$, et un système réel à plusieurs électrons en interaction soumis au potentiel réel. Cette approximation réduit le problème de " N électrons " à des équations mono-électroniques.

L'Hamiltonien de ce système a la forme suivante :

$$H_s = \sum_i^N (-\nabla_i^2) + \sum_i^N V_s(r_i). \quad (2.9)$$

L'équation de Schrödinger à résoudre dans le cadre de l'approximation de Kohn-Sham [31] a la forme suivante :

$$[-\nabla^2 + V_s(r)] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i. \quad (2.10)$$

L'énergie cinétique et la densité électronique sont données par :

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | -\nabla_i^2 | \psi_i \rangle \quad (2.11)$$

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2 \quad (2.12)$$

$T_s[\rho]$ ne représente pas la vraie fonctionnelle d'énergie cinétique. Kohn et Sham [31] ont résolu le problème de façon à faire correspondre $T_s[\rho]$ à l'énergie cinétique exacte.

La densité électronique de l'état fondamental est obtenue en résolvant les N équations monoélectroniques de Schrödinger :

$$[-\nabla_i^2 + V_{eff}(r)] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r), \quad (2.13)$$

et

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2. \quad (2.14)$$

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r - r'|} + V_{xc}(r) \quad (2.15)$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)}. \quad (2.16)$$

Ces auteurs ont défini une fonctionnelle $E_{xc}[\rho]$, qui correspond à l'échange-corrélation, et écrivent l'énergie totale du système sous la forme :

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r - r'|} + \int \rho(r) V_{ext}(r) dr + E_{xc}[\rho]. \quad (2.17)$$

L'efficacité de l'approche de Kohn-Sham dépend de la précision de l'énergie d'échange et de corrélation dont l'expression analytique est inconnue. Cependant, plusieurs approximations et paramétrisations sont proposées.

2.6 Les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation

2.6.1 Approximation de la densité locale LDA (Local Density Approximation)

C'est la méthode la plus simple pour décrire l'énergie échange-corrélation d'un système électronique. Dans cette approximation, la fonctionnelle $E_{xc}[\rho]$ peut s'écrire :

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int \rho(r)\varepsilon_{xc}(r)d^3r \quad (2.18)$$

$E_{xc}[\rho]$: l'énergie d'échange et de corrélation (par électron) d'un gaz d'électrons est égale à l'énergie d'échange et de corrélation (par électron) d'un gaz homogène d'électrons de même densité ρ .

ε_{xc} : est la contribution de l'énergie dans un gaz homogène (par électron). Elle peut être considérée comme la somme de la contribution d'échange et de corrélation.

$$\varepsilon_{xc}[\rho(r)] = \varepsilon_x[\rho(r)] + \varepsilon_c[\rho(r)]. \quad (2.19)$$

L'énergie d'échange $\varepsilon_x[\rho(r)]$ résulte de l'antisymétrie de la fonction d'onde vis-à-vis de l'échange des coordonnées électroniques.

L'énergie de corrélation s'exprime d'après :

$$E_c[\rho(r)] = \int \rho(r)\varepsilon_c(r)d^3r. \quad (2.20)$$

D'un point de vue pratique, cette approximation s'applique pour des systèmes dont la densité est homogène tels que les systèmes métalliques.

Cependant, ce type de fonctionnelle ne marche pas bien pour les systèmes dont la densité électronique varie brusquement, comme pour les structures ioniques ou moléculaires par exemple. Il est donc nécessaire de rendre plus précise la description de l'énergie d'échange-corrélation afin de pouvoir représenter correctement le système.

2.6.2 Approximation du Gradient Généralisé GGA (Generalized Gradient Approximation)

Cette approximation améliore les résultats de la LDA ; elle consiste à introduire un gradient de la densité afin de tenir compte de la non homogénéité de la densité électronique.

$$E_{xc}^{GGA} [\rho; \nabla\rho] = \int \varepsilon_{xc}^{GGA}(\rho(r), \nabla\rho(r)) dr. \quad (2.21)$$

avec

$$E_{xc}^{GGA} (\rho; \nabla\rho) = E_x^{GGA} (\rho; \nabla\rho) + E_c^{GGA} (\rho; \nabla\rho). \quad (2.22)$$

L'énergie d'échange peut être représentée comme suit :

$$E_x^{GGA} [\rho; \nabla\rho] = E_x^{LDA} - \int F(x_\sigma)\rho^{4/3}(r)dr, \quad (2.23)$$

où :

$\varepsilon_{xc}^{GGA}(\rho(r), \nabla\rho(r))$: représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme.

x_σ représente, pour le spin σ , le gradient de densité réduit (sans dimension). Cependant, l'approche GGA n'est pas toujours suffisante pour une description correcte de diverses propriétés chimiques des composés. C'est pourquoi, de nouveaux types de fonctionnelles ont été développées de manière à aller au-delà des résultats fournis par des méthodes GGA : on a les fonctionnelles meta-GGA (mGGA) et les fonctionnelles hybrides.

Parmi les codes les plus utilisés dans la simulation électronique pour l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques, on a le code VASP qui utilise les ondes planes augmentées *PAW* [32],[33] et le pseudopotentiel *PBE* [34],[35].

2.7 Le code de calcul VASP

Dans notre travail, on a utilisé le code VASP pour étudier quelque propriétés structurales, électroniques et magnétiques.

Le code VASP (Vienna ab initio Simulation Package) est un code permettant d'effectuer des calculs *DFT* en utilisant des fonctions d'onde qui sont développées sur une base d'ondes planes adaptée aux calculs périodiques. Il offre une précision et une efficacité pour la simulation numérique *ab initio*. Les fonctions d'onde développées dans l'espace réciproque sont définies pour un nombre infini de points k de la zone de Brillouin, chaque point contribuant au potentiel électronique. Pour l'évaluation numérique des intégrales portant sur les états occupés de chacun des points, le calcul est effectué avec une grille de points k de taille finie.

Pour générer automatiquement cette grille de points k dans le code VASP, la méthode de Monkhorst et Pack est utilisée.

Dans VASP, la détermination de l'état fondamental électronique se fait de façon itérative en séparant l'étape de la diagonalisation de l'Hamiltonien de Kohn-Sham de la densité de charge qui minimise l'énergie de Kohn-Sham.

2.7.1 Résolution des équations de Kohn Sham

Les équations de Kohn Sham sont résolues par une technique itérative dite auto-cohérente, visant à diagonaliser la matrice de l'hamiltonien. Pour cela, on a choisi une densité de charge électronique initiale, un potentiel $v(t)$ et des orbitales de Kohn-Sham $\phi(r)$ qui seront injectés pour construire l'hamiltonien H_{ks} . De nouveaux paramètres (valeurs et vecteurs propres) seront calculés, ils servent à construire une nouvelle densité électronique permettant de remonter au potentiel d'échange-corrélation ; cette procédure itérative est poursuivie jusqu'à ce que la convergence d'énergie ou de charge soit réalisée.

Une fois la convergence atteinte, on accède à l'énergie de l'état fondamental du système, l'ensemble de cette procédure est représentée sur la figure (2.1).

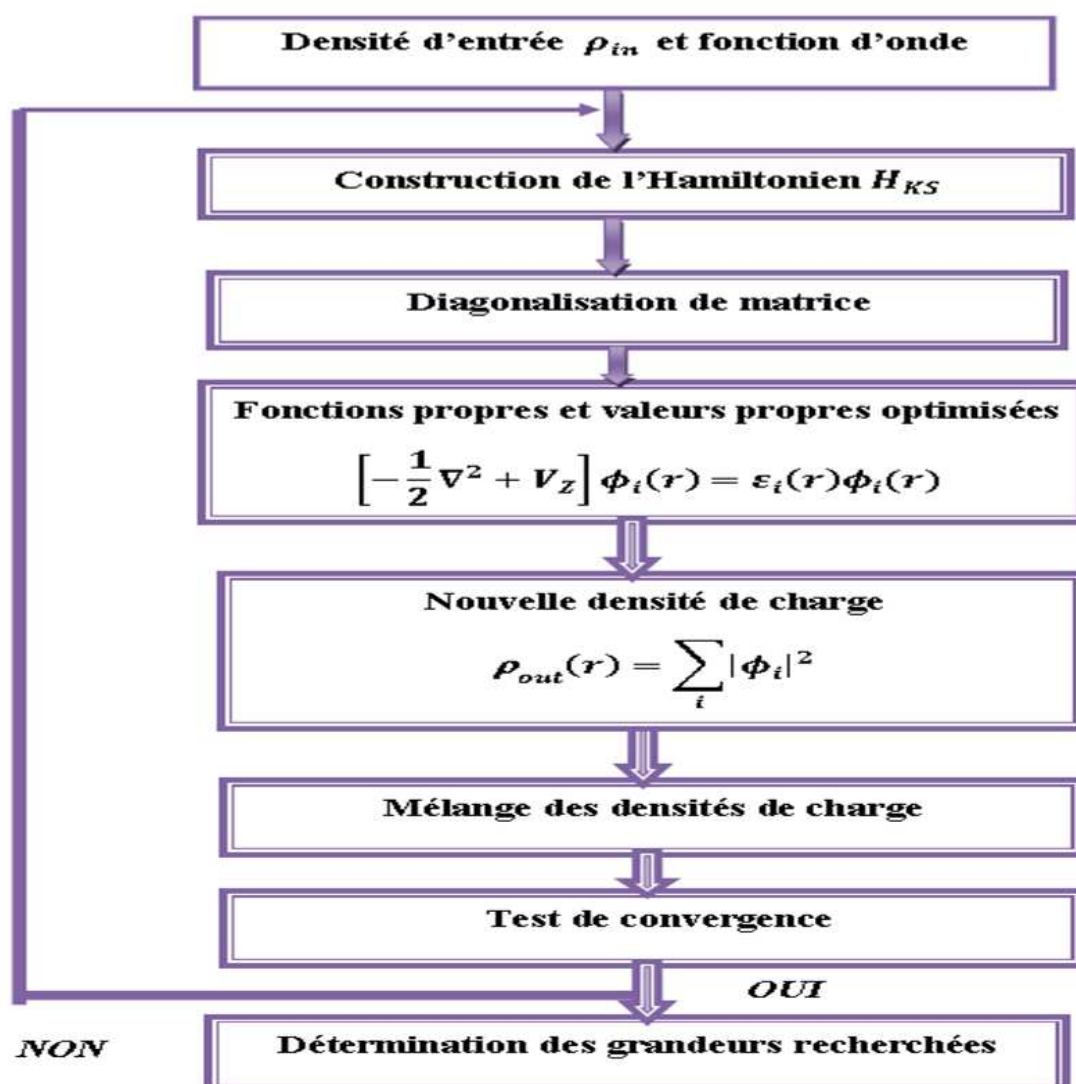


FIGURE 2.1 – Schéma de résolution du cycle auto-cohérent sur un calcul de convergence.

2.7.2 Ondes planes augmentées *PAW*

La méthode *PAW* est basée sur la transformation des fonctions d'onde des électrons de valence sur les fonctions lissées ; elle consiste à utiliser deux sortes de fonctions de base : l'une utilise des fonctions d'onde atomiques partielles à l'intérieur des cœurs , et l'autre, un ensemble de fonctions d'onde plane dans la région interstitielle. Il y a donc une séparation de l'espace en deux zones. La raison de cette séparation est le comportement du poten-

tiel effectif vu par les électrons de valence : dans la région interstitielle, la densité électronique totale est faible. Par conséquent, quelques ondes planes suffiront à décrire les états de valence de manière satisfaisante.

2.7.3 Les pseudopotentiels

La résolution des équations de Kohn-Sham pour des atomes de N électrons n'est pas possible numériquement. Les variations des fonctions d'ondes proches des noyaux, sont trop rapides pour être représentées avec une taille de base d'onde planes raisonnable.

Pour contourner cet obstacle, on utilise la notion pseudo-potentiel, qui est basé sur le fait qu'une grande partie des propriétés physico-chimiques des matériaux dépendent du comportement des seuls électrons de valence.

Les électrons de l'atome sont séparés en électrons de cœur et en électrons de valence. Les électrons de valence interviennent dans la liaison chimique, et les électrons de cœur liés au noyau atomique, sont très localisés, donc peu sensibles à l'environnement chimique de l'atome ; on les considère comme cœurs gelés. On a alors un ion rigide formé du noyau et des électrons de cœur, en interaction avec les électrons de valence. Les derniers véritables fonctions d'onde, sont remplacés par des pseudo fonctions d'onde sont remplacées par des pseudo-fonctions.

La figure (2.2) représente les principaux choix d'implémentation dans la DFT.

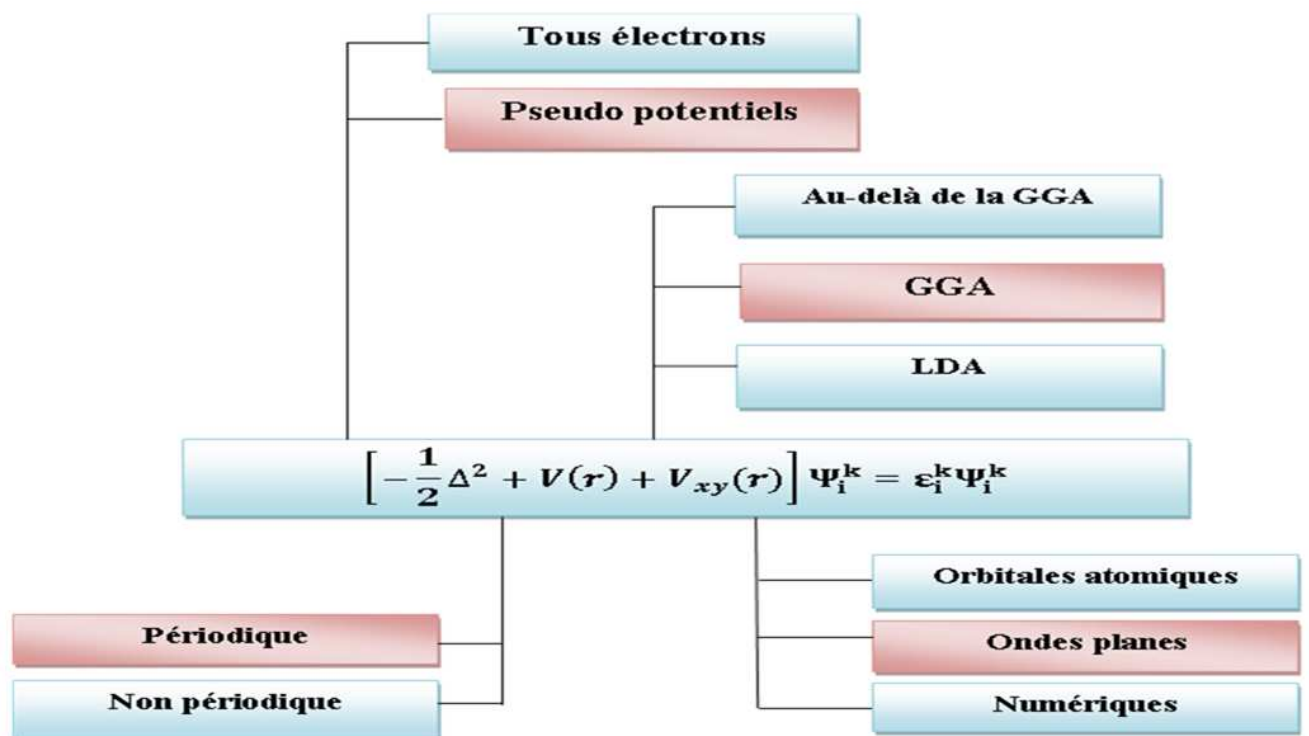


FIGURE 2.2 – Visualisation schématique des principaux choix d'implémentation dans la DFT.

Chapitre 3

Résultats et discussions

Dans ce chapitre, on s'intéresse à l'étude de la structure géométrique de l'alliage *FePt*, les moments magnétiques et les densités électroniques des couches d'alliage *FePt* de structure $L1_0$.

Avant de présenter les résultats et les discussions, une étude préliminaire s'avère nécessaire pour déterminer les paramètres d'équilibre (qui minimisent l'énergie totale du système) conditionnant la simulation ab-initio dans le formalisme [DFT+ondes planes+pseudopotentiel].

3.1 Etude préliminaire

La détermination de l'énergie de coupure et des points k (échantillonnage de la zone de Brillouin) est une première étape pour l'optimisation des structures géométriques (énergie totale du système minimale).

3.1.1 Variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure E_{cut}

L'influence de l'énergie de coupure sur le temps de convergence des calculs joue un rôle très important sur la taille de la base dans laquelle sont décrites les fonctions d'ondes.

La variation de l'énergie totale du système en fonction de l'énergie de coupure est représentée sur la figure (3.1). L'énergie totale du système se stabilise; elle est minimale pour une valeur de E_{cut} de 350 eV et 450 eV pour les configurations paramagnétique et ferromagnétique respectivement,

ce qui est en accord avec le résultat théorique de Dannenberg [36].

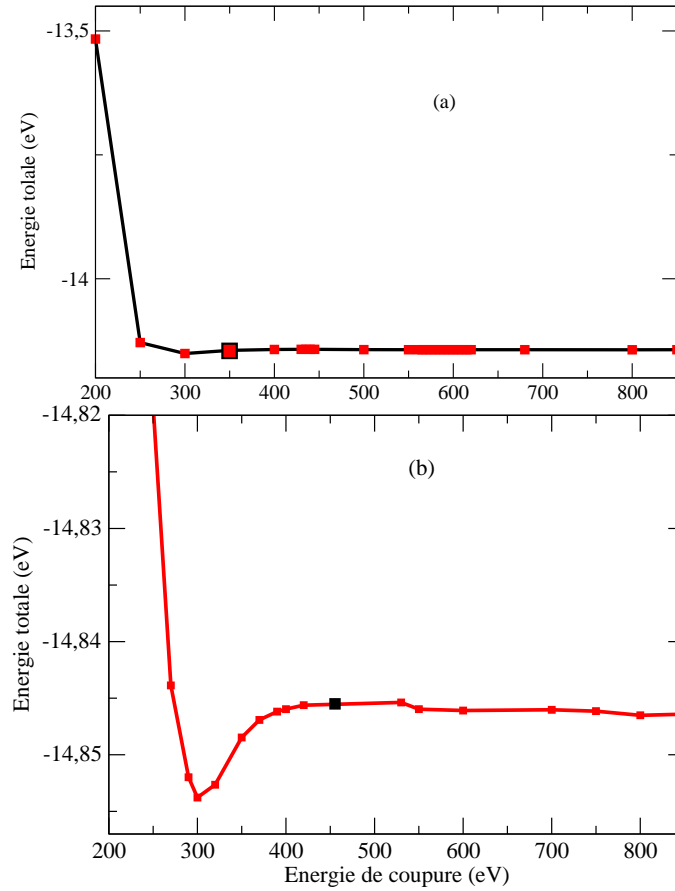


FIGURE 3.1 – Variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure : (a) Paramagnétique, (b) Ferromagnétique.

3.1.2 Maillage de la première zone de Brillouin

Les calculs des propriétés des systèmes périodiques nécessitent une intégration sur un nombre infini de points k , décrivant la zone de Brillouin dans l'espace réciproque. L'échantillonnage des points k sur une grille discrète permet de diviser la zone de Brillouin en petits volumes.

Par l'intégration de la zone de Brillouin, on calcule l'énergie totale en fonction de nombre de points ($k_x \times k_y \times k_z$) alors pour un intervalle allant de (2x2x1) jusqu'à (18x18x17); on obtient la figure (3.2).

Le minimum d'énergie totale est atteint pour un maillage correspondant

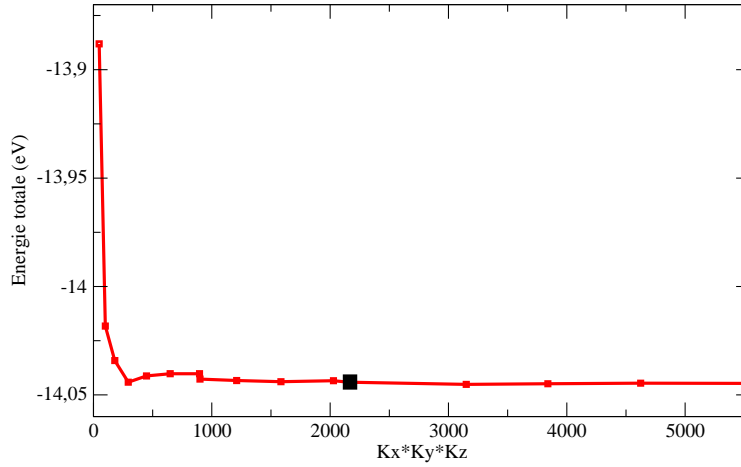


FIGURE 3.2 – Variation de l'énergie totale en fonction du maillage.

à (07X07X06), pour nos calculs, on a choisi la configuration (14X14X11), valeurs utilisées par Dannenberg [36].

3.2 Propriétés de l'alliage FePt

3.2.1 Structure géométrique

La variation de l'énergie totale du système, en fonction des paramètres a_t et c , est représentée sur la figure (3.3).

Les paramètres d'équilibre qui minimisent l'énergie totale du système sont comparés à d'autres résultats et sont donnés dans le tableau (3.1).

On remarque une petite différence des valeurs calculées c et a_t par rapport

| | Configuration paramagnétique | | | configuration ferromagnétique | | | |
|-----------------|------------------------------|-------|-------|-------------------------------|-------|-------|-------|
| | Valeur calculée | [37] | [15] | Valeur calculée | [37] | [15] | [36] |
| $a_t(\text{Å})$ | 2.66 | 2.77 | 2.72 | 2.73 | 2.71 | 2.71 | 2.69 |
| $c(\text{Å})$ | 3.69 | 3.78 | 3.71 | 3.77 | 3.73 | 3.71 | 2.70 |
| c/a | 0.980 | 0.962 | 0.963 | 0.97 | 0.969 | 0.974 | 0.976 |

TABLE 3.1 – Comparaison des paramètres d'équilibres.

aux résultats trouvés par les autres auteurs, légèrement inférieures (2 à 4%) pour la configuration paramagnétique et légèrement supérieures (0.5 à 0.7%) pour la configuration ferromagnétique.

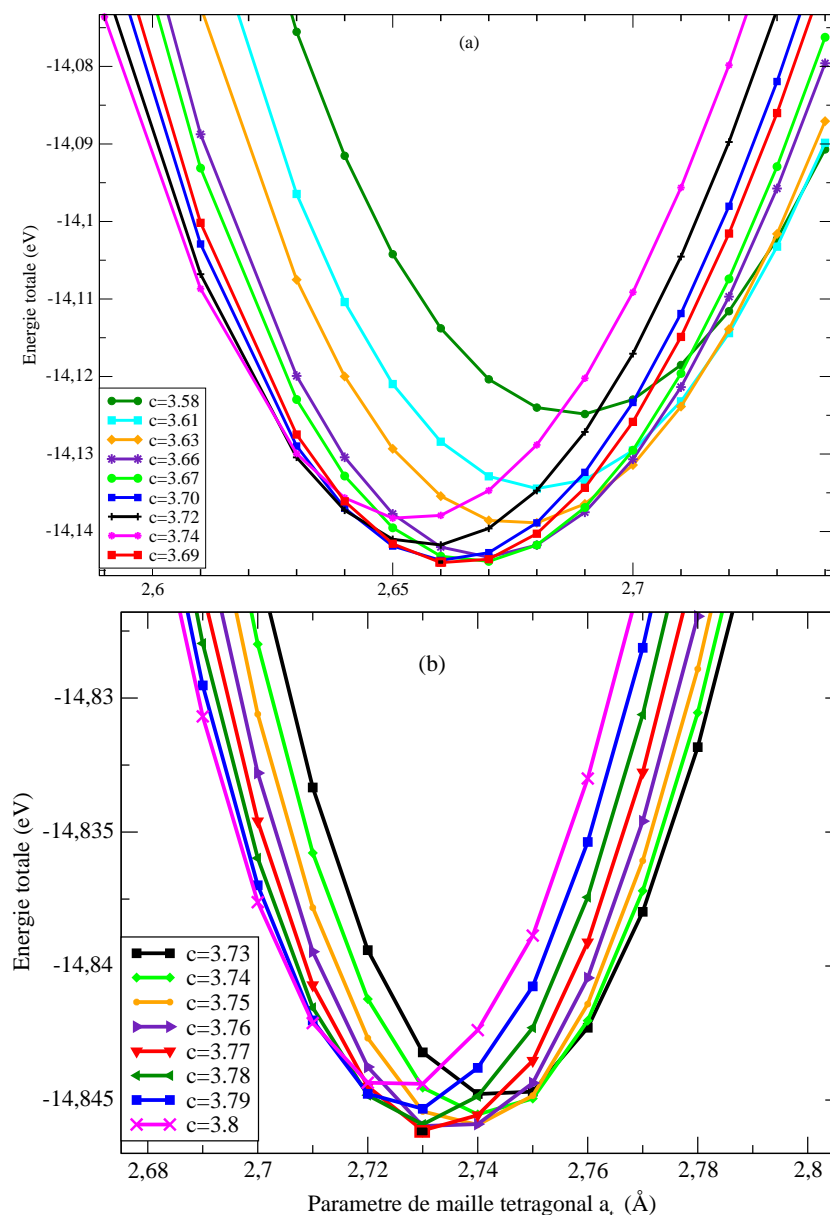


FIGURE 3.3 – Variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille tétragonal : (a) Paramagnétique, (b) Ferromagnétique.

3.2.2 Les densités d'états électroniques

On a calculé les densités d'états partielles s , p et d de fer en volume dans le cas paramagnétique (figure 3.4).

Les états s, p sont faibles, la contribution de ces électrons est négligeable

devant celle de la bande d .

Le niveau de Fermi est indiqué par la ligne verticale.

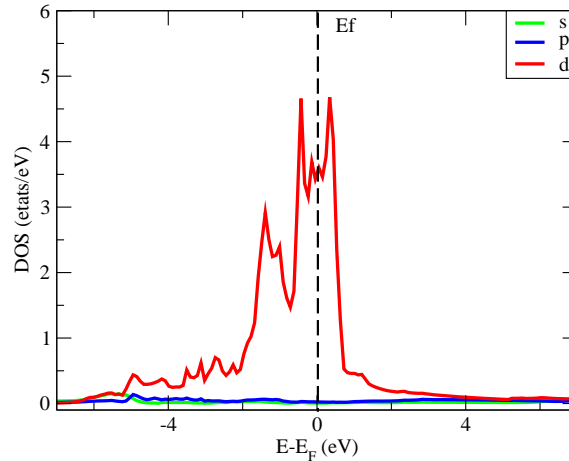


FIGURE 3.4 – Densité d'état partielle de fer en volume.

Vu que les métaux de transition sont caractérisés par un remplissage progressif de la bande d , seules les densités électroniques de cette dernière seront représentées (figure 3.5).

On remarque une forte hybridation des bandes $3d(\text{Fe})$ - $5d(\text{Pt})$, la densité électronique locale de fer jouent un rôle dominant dans la densité totale de FePt .

Au niveau de Fermi, les courbes des densités d'états de spin up (majoritaire) de fer et de platine ne sont pas symétriques avec celles de spin down (minoritaire). Les bandes majoritaires et minoritaires sont décalées par rapport au niveau de Fermi dans des sens différents, ce qui provoque le passage d'une partie des spins minoritaires aux spins majoritaires : c'est le caractère magnétique de ce matériau ; il peut être expliqué dans le cadre des électrons itinérants par la théorie de Stoner, qui donne une description qualitative de la condition nécessaire de l'apparition du magnétisme dans les alliages.

Cette condition traduit le fait que le ferromagnétisme des éléments $3d(\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni})$ et le paramagnétisme des éléments $4d(\text{Pd}) - 5d(\text{Pt})$ est une conséquence de la diminution des densités d'états au niveau de Fermi lors du passage de la première série à la seconde. Cette densité est d'autant moins grande que la largeur de bande d est importante.

Ce critère est formulé mathématiquement par :

$$I \cdot n(E_F) > 1 \quad (3.1)$$

avec

I : paramètre de Stoner (paramètre d'échange intra-site), contrôle les propriétés magnétiques des matériaux, (il augmente avec le remplissage électronique).

$n(E_F)$: densité d'état au niveau de Fermi.

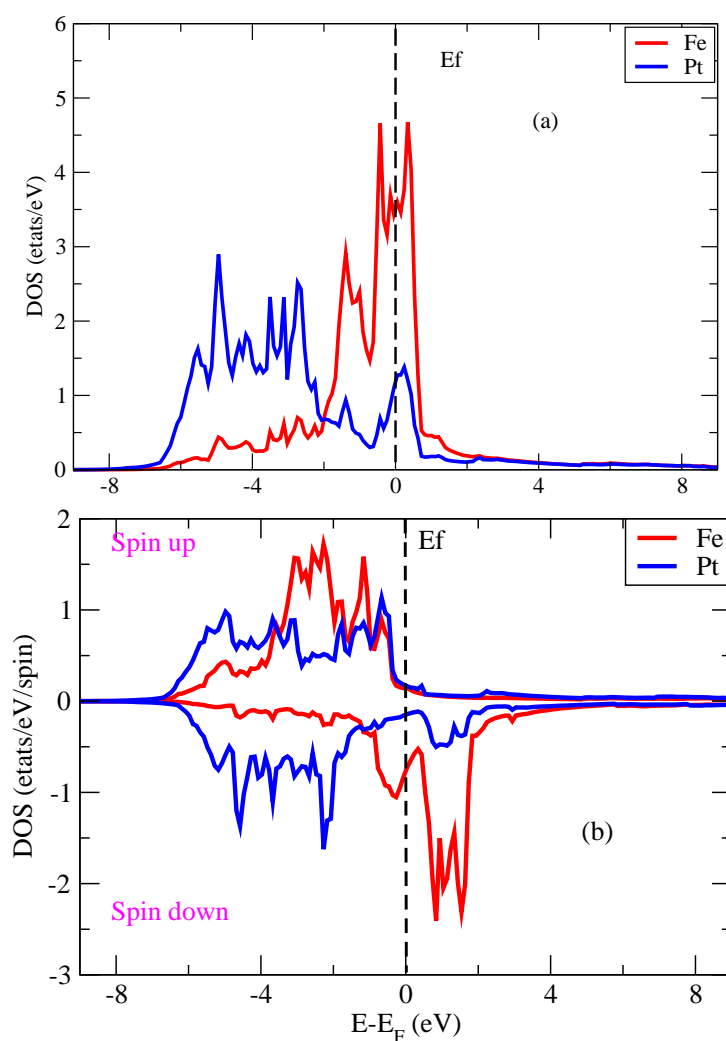


FIGURE 3.5 – Densités d'états partielles de l'alliage FePt : (a) paramagnétique, (b) ferromagnétique.

3.2.3 Moments magnétiques

Le magnétisme du solide est déterminé par le gain en énergie d'échange dû à la formation d'un moment magnétique total qui apparaît au niveau de Fermi, provoqué par la différence entre le nombre d'électrons de spin majoritaire et de spin minoritaire qui peuplent les bandes $3d$, le moment magnétique orbital étant faible.

La comparaison de nos moments calculé et d'autres résultats est donnée dans le tableau (3.2).

| | Mom de Fe ($\mu B/atome$) | Mom de Pt ($\mu B/atome$) | Methode | Approx |
|--------------|-----------------------------|-----------------------------|--------------|---------|
| notre valeur | 2.976 | 0.353 | VASP | GGA |
| [36] | 3.062 | 0.362 | VASP | GGA |
| [38] | 2.96 | 0.34 | FP-LMTO | GGA |
| [39] | 2.89 | 0.35 | FP-LAPW | LSDA+OP |
| [40] | 2.937 | 0.296 | EMTO-CPA | LSDA |
| [41] | 2.93 | 0.33 | LMTO-ASA | LSDA |
| [42] | 2.78 | 0.34 | ASW | LSDA |
| [43] | 2.77 | 0.35 | GFT | SIA |
| [44] | 2.84 | 0.3 | experimental | |

TABLE 3.2 – Comparaison des moments magnétique.

On remarque que notre calcul est en bon accord avec les autres résultats, on a un moment de fer qui est prédominant et un faible moment magnétique de platine induit de l'hybridation des bandes $3d - 5d$.

3.3 Propriétés des couches de l'alliage FePt

Créer une surface revient à couper un cristal en deux parties, le passage de volume en surface se traduit donc par un abaissement de symétrie, car le nombre de coordination d'un atome en surface est inférieur à celui en volume. En simulation, cette symétrie se traduit par l'introduction d'un vide entre les slabs, une distance suffisamment grande (environ 15\AA), pour négliger les interactions inter-slabs¹ dans la direction (001) (figure 3.6). Pour étudier les propriétés des films minces de fer et de platine en surface

1. slab (en anglais) : désigne une alternance des plans de fer et de platine correspondant à un empilement englobant la première zone de Brillouin.

suivant la direction (001), on a pris les énergies de coupure du volume, un maillage de (14x14x1), et des slabs symétriques de neuf et de onze plans qu'on laisse relaxer. Ce choix a été pris pour compléter l'étude de Dan-nangerg qui a pris un slab de douze plans atomiques [36].

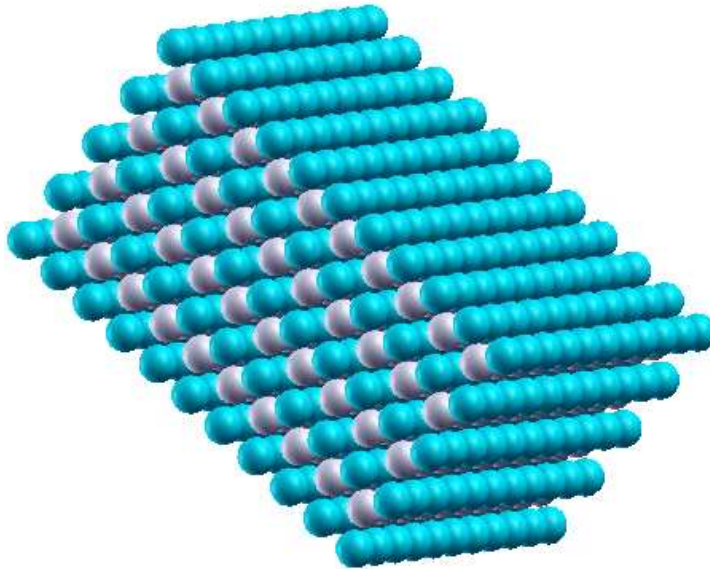
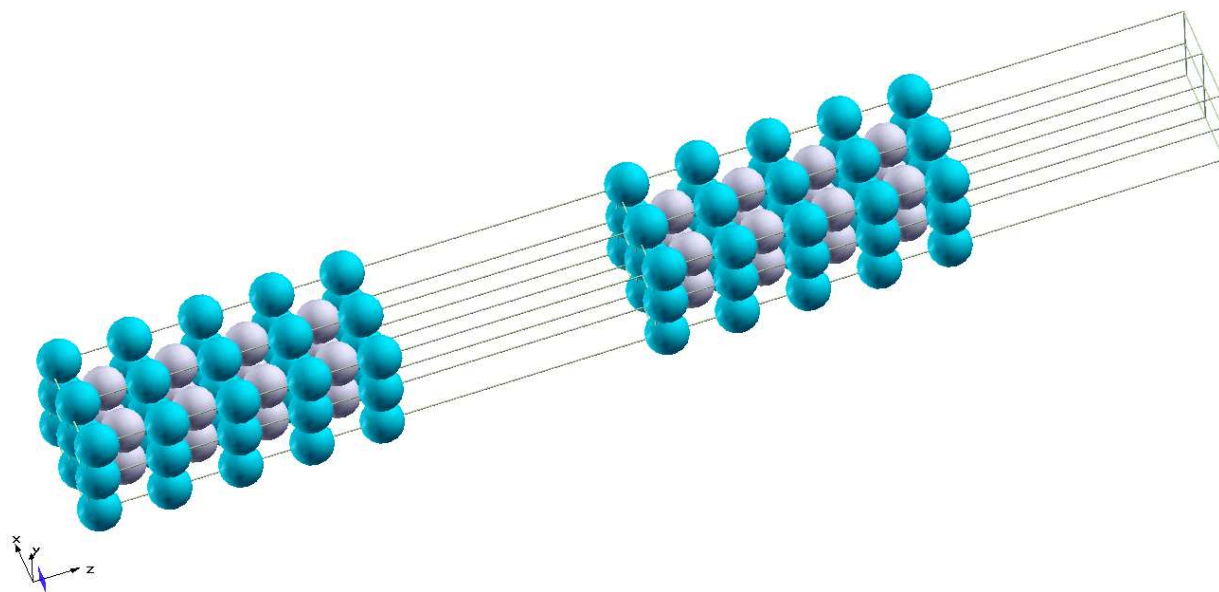


FIGURE 3.6 – Empilement des plans de fer et de platine (direction (001)).

3.3.1 Relaxation des plans atomiques

Après la relaxation de tous, les plans atomiques par rapport au plan central, dans la direction Z , on a une stabilité qui correspond à un minimum d'énergie; comme on a pris un slab symétrique (figure 3.9), on s'intéresse juste aux couches de surface, subsurface et de sub-subsurface. Par la suite, on a calculé les déplacements inter-plans en utilisant la relation : $\delta d = \frac{d_{slabrelaxé} - d_{slabnonrelaxé}}{d_0}$, avec d la distance entre deux plans successifs des slab relaxé et non relaxé, d_0 la distance entre le plan central et le plan suivant (qui ont les mêmes caractéristiques du volume). L'ensemble des résultats obtenus sont donnés dans les tableaux (3.3)-(3.4)-(3.5)-(3.6).

FIGURE 3.7 – *Slab symétrique de fer et de platine (direction (001)).*

| Plans | $\delta d / d_0 (\%)$ | |
|------------|-----------------------|----------------------|
| | Etat paramagnétique | Etat ferromagnétique |
| S (Fe1) | -0.41 | -0.4 |
| S-1 (Pt1) | -1.16 | -0.21 |
| S -2 (Fe2) | -1.00 | -0.08 |

TABLE 3.3 – Relaxation des distances inter-plans, neuf plans atomiques, fer en surface.

| Plans | $\delta d / d_0 (\%)$ | |
|------------|-----------------------|----------------------|
| | Etat paramagnétique | Etat ferromagnétique |
| S (Pt1) | -0.74 | -0.16 |
| S-1 (Fe1) | -1.24 | -0.89 |
| S -2 (Pt2) | -1.33 | -0.65 |

TABLE 3.4 – Relaxation des distances inter-plans, neuf plans atomiques, platine en surface.

| Plans | $\delta d / d_0 (\%)$ | |
|------------|-----------------------|----------------------|
| | Etat paramagnétique | Etat ferromagnétique |
| S (Fe1) | -3.05 | -0.11 |
| S-1 (Pt1) | -1.05 | -0.3 |
| S -2 (Fe2) | 0.89 | -0.12 |

TABLE 3.5 – Relaxation des distances inter-plans, onze plans atomiques, fer en surface.

| plans | $\delta d/d_0(\%)$ | |
|-------------|---------------------|----------------------|
| | Etat paramagnétique | Etat ferromagnétique |
| S (Pt1) | -0.44 | -0.18 |
| S-1 (Fe1) | -1.05 | -0.75 |
| S -2 (Pt2) | -0.94 | -0.65 |

TABLE 3.6 – Relaxation des distances inter-plans, onze plans atomiques, platine en surface.

Une compression de toutes les distances inter-plans est observée; on remarque que , dans la plupart des cas, seuls les plans de surface et de subsurface se relaxent, avec une contraction de quelques % qui conduit à un élargissement des bandes d . Le déplacement relatif des plans atomique est dû à la création des surfaces.

On a aussi calculé les énergies de surface, normalisé aux nombre d'atomes, pour les différentes couches minces (3.7) afin de déterminer la configuration la plus stable, celle qui nécessite moins d'énergie pour sa formation; l'expression de cette énergie est donnée par la relation (3.2) :

$$E_{surf} = E_{slab} - E_{bulk} \quad (3.2)$$

avec :

E_{surf} : énergie par atome en surface.

E_{slab} : énergie par atome du slab.

E_{bulk} : énergie par atome du système FePt en volume.

| | | Energie de surface (eV/atome) | |
|--------------------------|--------------------|-------------------------------|----------------------|
| | | Etat paramagnétique | Etat ferromagnétique |
| Neuf plans | Fer en surface | 2.092 | 1.721 |
| | platine en surface | 1.965 | 2.975 |
| Onze plans | Fer en surface | 1.632 | 1.414 |
| | Platine en surface | 1.653 | 2.304 |
| Douze plans (Dannanberg) | Fer en surface | | 1.038 |

TABLE 3.7 – Energies de surfaces.

Les énergie de surface des configurations ferromagnétique (neuf et onze plans atomiques, fer en surface) sont très proches et plus faibles que celle du platine en surface, ce qui est en accord avec le résultat de Dannanberg.

3.3.2 Les densités d'états électroniques

On a calculé les densités d'états électroniques ferromagnétique pour les différentes configurations, (neuf et onze plans, fer ou platine en surface).

3.3.2.1 Neuf plans atomiques fer en surface

Les densités d'états partielles du fer en volume, en surface, et en sub-surface et le platine en sub-surface sont représentées sur la figure (3.8).

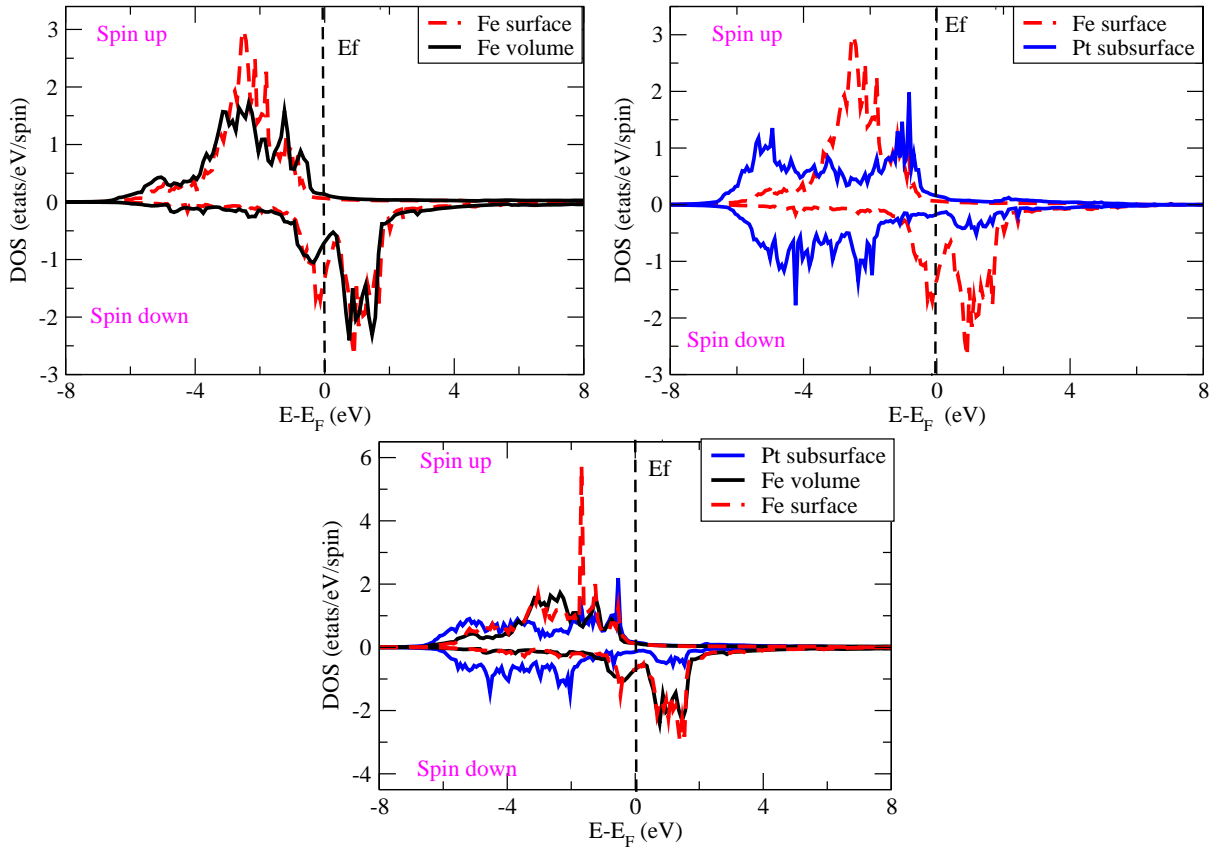


FIGURE 3.8 – Densités d'états partielles, neuf plans atomiques, fer en surface.

On a une hybridation dû au chevauchement des bandes $3d(Fe)$ et $5d(Pt)$; le spectre de surface à mi-hauteur est légèrement rétréci par rapport à celui de volume : on a donc une densité d'état en surface qui est plus grande, conformément à la relation (3.3) :

$$W_s = W_v \sqrt{Z_s/Z_v} \quad (3.3)$$

avec :

W_s : largeur de bande de la densité d'état local d'un atome de surface, W_v : largeur de bande de la densité d'état local en volume, Z_s et Z_v : représentent respectivement la coordination d'un atome de surface et de volume. En une surface, la coordinance diminue puisqu'on augmente le nombre de liaisons coupées ; donc W diminue.

3.3.2.2 Neuf plans atomiques platine en surface

La même étude a été faite pour le platine en surface ou en volume et le fer en subsurface, les densités d'états partielles sont représentées sur les figures (3.9).

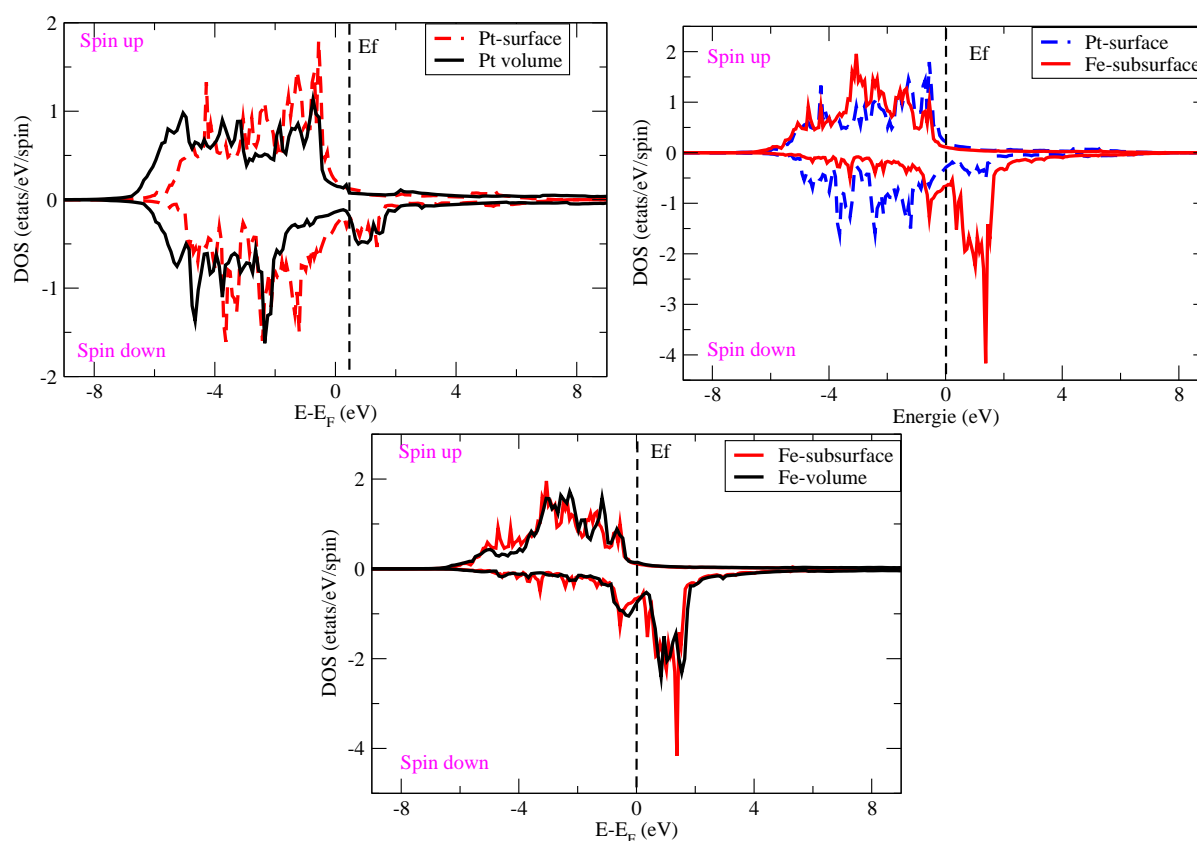


FIGURE 3.9 – Densités d'états partielles, neuf plans atomiques, platine en surface.

La densité d'état de platine en surface est presque la même que celle en volume, on a l'effet de surface qui est faible (élément non magnétique), et

on remarque un faible décalage entre les bandes up et down dû au moment magnétique de platine induit par le moment de fer.

3.3.2.3 Onze plans atomiques fer en surface

Les densités d'états partielles calculées, fer en surface, fer en volume et le platine en subsurface sont représentées sur la figure (3.10).

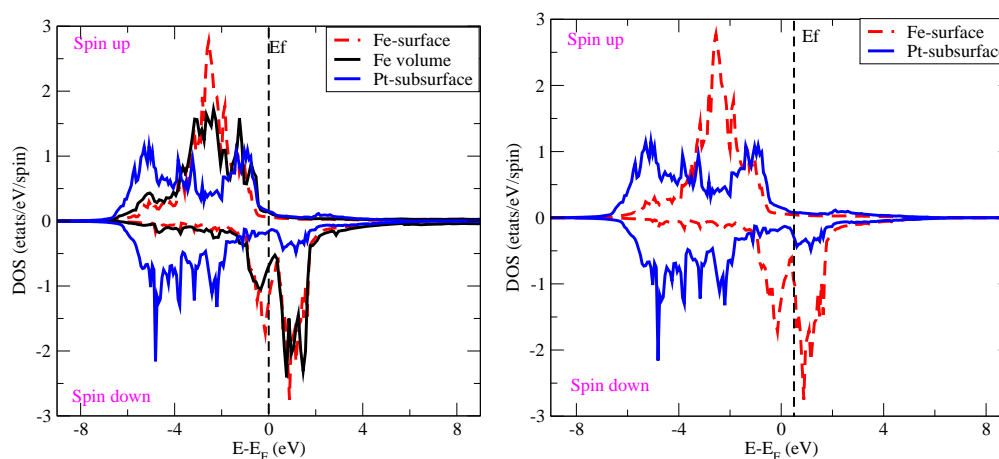


FIGURE 3.10 – Densités d'états partielles, onze plans atomiques, fer en surface.

La densité de fer en surface est rétrécie par rapport à celle en volume (faible coordination en surface), et on a l'hybridation entre les bandes (apparition d'un moment magnétique induit du platine).

3.3.2.4 Onze plans atomiques platine en surface

Les densités d'états partielles calculées pour platine en surface et en volume ainsi que le fer en subsurface sont représentées sur la figure (3.11).

La densité d'état de fer en sub-surface est plus grande que celle de platine en surface (on a une forte hybridation des bandes $3d$ et $5d$), ainsi on remarque un faible effet de surface (on a une faible polarisation, donc un faible moment induit).

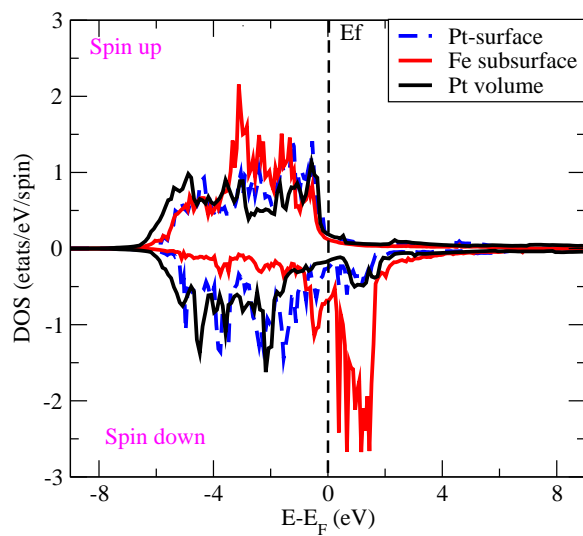


FIGURE 3.11 – Densités d'états partielles, onze plans atomiques, platine en surface.

Les différentes densités d'états partielles calculées, (neuf et onze plans atomiques, platine ou fer en surface), sont comparées dans les figures (3.12). Les densités d'états des différentes configurations, fer où platine en surface, sont indépendantes du nombre de couches (9 ou 11 plans atomiques).

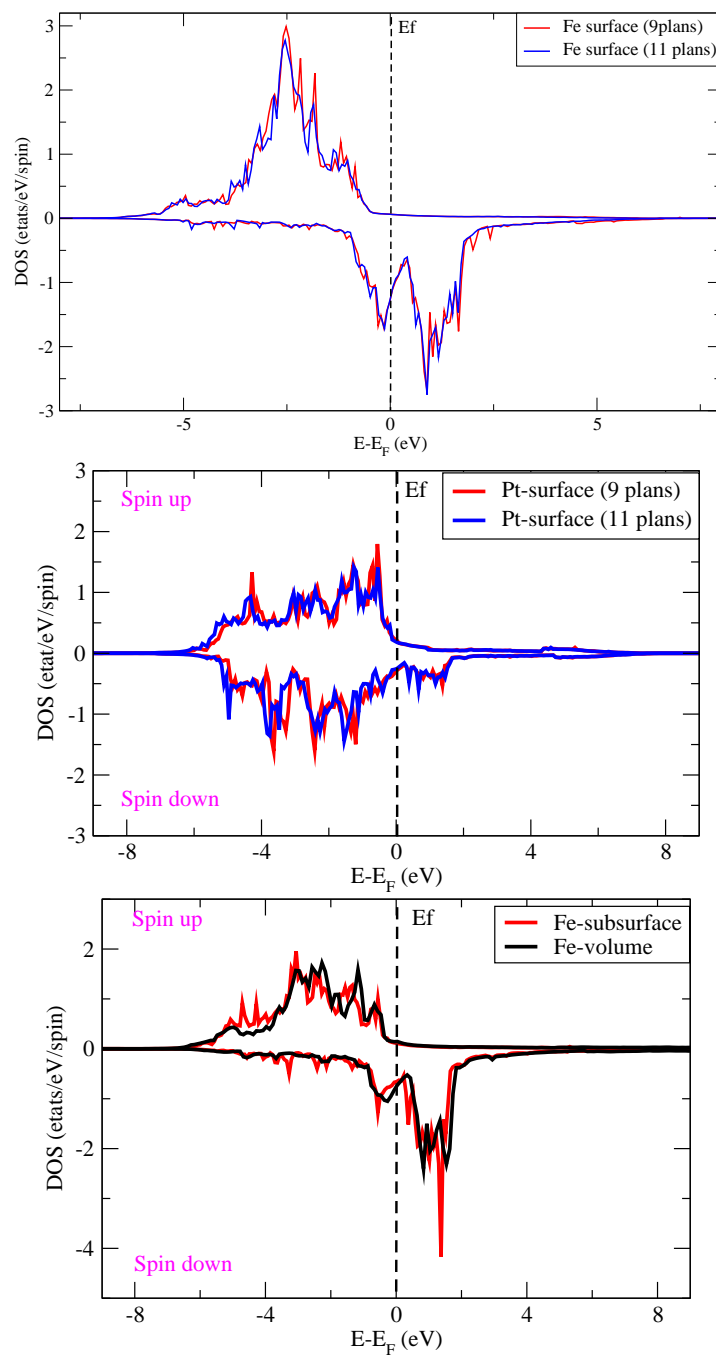


FIGURE 3.12 – Densités d'états partielles, neuf et onze plans atomiques.

3.3.3 Moments magnétiques

La variation du moment magnétique en fonction du numéro du plan de fer pour les différentes configurations est représentée sur les figures

(3.13),(3.14). Les moments magnétiques des différents plans atomiques

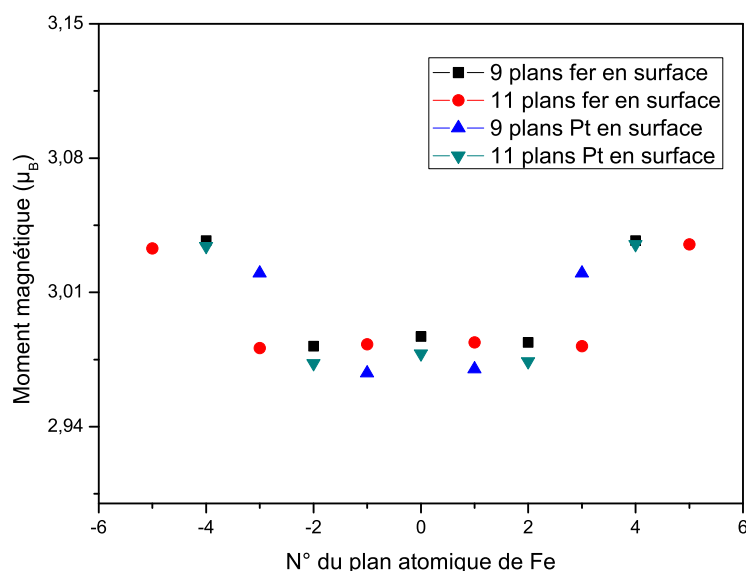


FIGURE 3.13 – Variation du moment magnétique en fonction du numéro de plan de fer.

du fer sont plus élevés sur les deux plans de surface et s'approche de celle obtenue en volume ; au fur et à mesure que la dimensionnalité des coordinations augmente (lorsqu'on s'approche du plan central). Le moment magnétique (induit) des différents plans atomiques de platine varie entre 0.336 et $0.433\mu_B$ pour les différentes configurations.

Les moments totaux des slabs sont résumés dans le tableau (3.8).

| | | Moment total (μ_B) | Moment total ($\mu_B/atome$) |
|-------------|--------------------|--------------------------|--------------------------------|
| Neuf plans | Fer en surface | 16.41 | 1.82 |
| | platine en surface | 13.72 | 1.53 |
| Onze plans | Fer en surface | 19.72 | 1.79 |
| | Platine en surface | 17.11 | 1.75 |
| Douze plans | Fer en surface | | 1.70 |

TABLE 3.8 – Moment magnétique total.

On remarque que les moments totaux pour la configuration onze plans atomiques sont plus grand que ceux de neuf plans atomiques de 14% et 19% respectivement fer où platine en surface. Les valeurs des moments

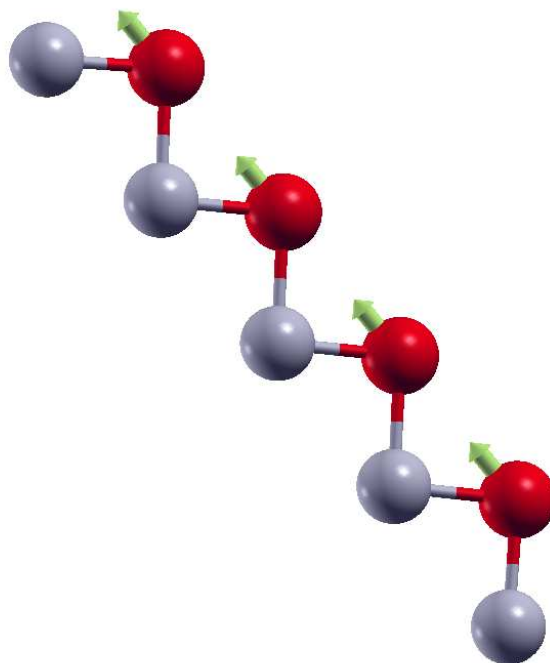


FIGURE 3.14 – *Slab avec les moments magnétiques sur les atomes de fer (échelle 1).*

magnétiques totaux/atomes sont en accord avec la valeur théorique de Dannenberg.

Conclusion générale

L'objectif de notre travail de mémoire de master était l'étude de quelques propriétés de l'alliage binaire FePt (volume et surface) de structure $L1_0$. Cette étude est effectuée dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité dans l'approximation GGA à l'aide du code *VASP*, les fonctions d'ondes étant développées sur une base d'onde planes. Les calculs ont été faits dans les configurations paramagnétique et ferromagnétique.

Une optimisation des paramètres de convergence du code de calcul, qui consiste en la détermination de l'énergie de coupure, l'échantillonnage de la zone de Brillouin et des paramètres de maille de la structure $L1_0$ la plus stable (l'énergie totale du système minimale) a été réalisée.

Les calculs des densités d'états électroniques, pour les configurations les plus stables de la structure géométrique de l'alliage FePt $L1_0$, ont montré l'importance de l'hybridation des bandes $3d$ (fer) et $5d$ (platine), ainsi que le décalage des bandes d (up et down). Les contributions des moments magnétiques de fer et de platine ont été aussi calculées et trouvées en bon accord avec les autres résultats.

La relaxation de tous les plans atomiques des couches d'alliage (9 et 11 plans atomiques) nous a permis de remarquer une compression sur tout le slab, ce qui conduit à un élargissement des bandes d .

Les configurations ferromagnétique, 9 et 11 plans, fer en surface, ont une énergie minimales.

Le calcul de l'énergie de surface nous a permit de dire que le fer en surface est en bon accord avec les résultats théoriques.

Les densités d'états ont montré que le passage du volume en surface s'accompagne d'une brisure de symétrie : rétrécissement de la bande d (diminution de nombre de coordinations) et un moment magnétique plus grand.

La variation des moments magnétiques locaux des différents plans de fer, en fonction du numéro de plan de fer, nous a montré que les valeurs calculées sont plus grande en surface et de même ordre de grandeur que le volume (dès le 3^{eme} plan et pour tout les configurations).

Perspective : Etude des défaut d'empilement : défaut en fer et en platine.
Etude des anti-sites. Etude de la configuration antiferromagnétique.

Bibliographie

- [1] Pierre Weiss, *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, 5(1) :435-453 (1896).
- [2] G. S. Mahajani . In *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 23 de *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, page 136 (1926).
- [3] F. C. Powell. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 130 :167-181, (dec 1930). F. Zwicky. *Physical Review*, 38(9) :1772-1781, (Nov 1931).
- [4] F. Bloch et G. Gentile. *Z. Physik A*, 70(5-6) :395-408, (May 1931).
- [5] J. W. Shih. *Physical Review*, 46(2) :139-142, (Jul 1934).
- [6] William F. Brown. *Rev. Mod. Phys.*, 17(1) :15-19, (Jan 1945).
- [7] J. R. Chamberlain. *Proceedings of the Physical Society*, 78(5) :819-827, (1961).
- [8] Li Ning et B.M. Lairson. *IEEE Transactions on Magnetics*, 35(2) :1077-1082, Jan 1999.
- [9] D. Weller, A. Moser, L. Folks, M.E. Best, Wen Lee, M.F. Toney, M. Schwickert, J.-U. Thiele et M.F. Doerner. *IEEE Transactions on Magnetics*, 36(1) :10-15, Jan 2000.
- [10] Coffey K.R. M.A. Parker, and J.K. Howard. *IEEE Trans. Magn.*, 31 (1995).
- [11] S. Föähler, V. Neu, M. Weisheit, U. Hannemann, S. Leinert, A. Singh, A. Kwon, S. Melcher, B. Holzapfel et L. Schultz. *Proc. 18th Int. Workshop on High Performance Magnets and their Applications*, 2 :566, (2004).

-
- [12] T. Suzuki, MRS Bull. 21, (1996) 42.
- [13] M. Mansuripur et G. Sincerbox, Proc. IEEE 85, 1780 (1997).
- [14] G.R. Harp, D. Weller, T.A. Rabedeau, R.F.C. Farrow and M.F. Toney, Phys. Rev. Lett. 71, , p. 2493 (1993)
- [15] A.Cebolada, R. F. C. Farrow et M. F. Toney, Magnetic Nanostructures, Ed. H. S. Nalva (2002)
- [16] D. Weller, H. Brändle and C. Chappert, J Magn. Magn. Mater, 121, (1993), p. 461.
- [17] O. Ersen, V. Parasote, V. Pierron-Bohnes, M.C. Cadeville and C. Ullhaq-Bouillet, J. Appl. Phys. 93 (2003), p. 2987.
- [18] Liu J.P., C.P. Luo, Y. Liu and D.J. Sellmyer. Applied Physics Letters, 72, (1998).
- [19] T. Massalsky (Eds.), Binary Alloy Phase Diagrams, 2nd Edition, ASM International, Materials Park, OH (1996).
- [20] P. Fredriksson, Doctoral dissertation, Royal Institute of Technology, Stockholm (2003).
- [21] F.R. de Boer, R. Boom, W.C.M. Mattens, A.R. Miedema et A.K. Niessen. Elsevier Science, North Holland Physics, 1er Edition, (1988).
- [22] C. Chappert et A. Barthélémy, Nanosciences, chap. 14, (2006)
- [23] O. A. Ivanov, L. V. Solina et V. A. Demshina, Phys. Met. Metallogr. 35, 81 (1973).
- [24] D. Weller, A. Moser, IEEE Trans. Magn. 35 (1999)4423.
- [25] X. Yang, C. Liu, J. Yu, T. Klemmer, E. Johns, and D. Weller, J. Vac. Sci. Technol, B 22 31, (2004).
- [26] M. Born, J. R. Oppenheimer, Ann. Physik. 84, 457 (1927).
- [27] D.R. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. 24, 89 (1928).
- [28] V. Fock, Z. Phys. 61, 126 (1930).
- [29] J. C. Slater, Phys. Rev. 81, 385 (1951).
- [30] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev. 1, 36, B 864 (1964).
- [31] W. Kohn et L.J Sham, Phys. Rev. 140, A1113 (1965).

-
- [32] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B, 54, 11169 (1996).
- [33] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).
- [34] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, 77, 3865 (1996).
- [35] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [36] A. Dannenberg, Antjeand Gruner, Ernst Markusand Hucht, Alfredand Entel, Peter, Physical Review B 80 , (2009).
- [37] L. Messad Thèse de doctorat, Université de Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou, Algérie, (2009).
- [38] I. Galanakis, M. Alouani et H. Dreyssé, Physical Review B 62, 10 (2000).
- [39] Alexander B. Shick et Oleg N. Mryasov. Phys. Rev. B 67, 17 (2003).
- [40] T.Burkert, O.Erikson, S. I. Simak, A. V. Rurn, B. Sanyal, L. Nordström et J. M. Wills. Phys. Rev. B 71, 13 (2005).
- [41] A. Sakuma. J. Phys.Soc. Jpn 63, 8 (1994).
- [42] P. M. OPPENEER. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 188,3 (1998).
- [43] I. V. Solovyev, P. H. Dederichs et I. Mertig. Phys. Rev. B 52, 18 (1995).
- [44] J. Lyubina, I. Opahle, M. Richter, O. Gutfleisch, K.-H. Müller et L. Schultz, Applied Physics Letters 89, 3 (2006).