الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة تيسمسيلت

نيابة العمادة المكلفة بما بعد التدرج
والبحث العلمي والعلاقات الخارجية
كلية العلوم والتكنولوجيا

الأسم واللقب :بوادي عبد القادر إلياس

الملخص:

في هذه الرسالة، أُجريت دراسة شاملة اعتمادًا على حسابات المبادئ الأولية، لخصائص البنية، والمرنة، والميكانيكية الحرارية، والإلكترونية، والمغناطيسية لسبائك هوسلر الكاملة القائمة على العناصر الأرضية النادرة والمعادن الانتقالية، وهي : Rn_2MnZ, Ir_2ScZ, Pr_2CoZ, Pr_2RhZ، إضافة إلى مركب هوسلر الرباعي CrPrCoZ، حيث إن Z = Al :أو Ga أو In أو Ge أو Sn أو Te أو Sb.

أُجريت جميع الحسابات في إطار نظرية دالة الكثافة(DFT) ، باستعمال طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية ذات الجهد الكامل(FP-LAPW) ، كما هي مطبقة في برنامج .WIEN2kواستُخدمت دالة التبادل والارتباط GGA-PBEلتحسين البنية البلورية وحساب خصائص التوازن، مثل حجم الخلية، وثوابت الشبكة، ومعاملات المرونة.

تم تقييم الاستقرار الميكانيكي وقابلية البنية اعتمادًا على معايير بورن، من خلال حساب معاملات المرونة، كما تم تحليل البنية الإلكترونية المستقرة عبر دراسة بنية نطاق الحزمة الإلكترونية، وكثافة الحالات الكلية والمُسقطة (DOS/PDOS) لدراسة استقطاب الدوران، وتحديد وجود السلوك شبه المعدني أو السلوك المعدني غير المغزلي.

كما تمت دراسة الخواص المغناطيسية بمقارنة الأطوار المغناطيسية الحديدية، واللامغناطيسية، والفيرومغناطيسية المضادة، وأظهرت النتائج أن العزوم المغناطيسية الكلية والذرية لعدد من المركبات تتبع قاعدة **سلاتر–بولينغ**، بما يدل على وجود عزم مغناطيسي صحيح واستقطاب مغزلي قوي.

كما تمت دراسة الخصائص الاهتزازية والميكانيكية الحرارية باستخدام نموذج **ديباي** شبه التوافقي لتحليل السعات الحرارية، والإنتروبيا، ومعاملات التمدد الحراري، ودرجات حرارة ديباي بدلالة درجة الحرارة والضغط.

وقد بينت النتائج أن هذه المركبات تمتلك ثباتًا بنيويًا، ومرونة ميكانيكية، وسلوكًا إلكترونيًا، وأن استقطابًا مغزليًا قويًا وطابعًا شبه معدني، وتوزيعًا مغناطيسيًا مستقرًا يجعلها مرشحة مناسبة لتطبيقات السبينترونيك، وأجهزة الاستشعار المغناطيسية، والتقنيات المؤثرة للطاقة.

RESUME:

Dans cette thèse, nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques, électroniques, magnétiques, vibrationnelles et thermodynamiques des alliages de Heusler **Pr_2RhZ, Pr_2CoZ, Ir_2ScZ, Rn_2MnZ** ainsi que du composé de Heusler quaternaire **CrPrCoZ**, où **Z = Al, Ga, In, Ge, Sb, Sn** ou **Te**. Ces matériaux appartiennent à la famille des composés de Heusler à base de terres rares et de métaux de transition, réputés pour leurs propriétés physiques remarquables et leur potentiel dans les applications spintroniques.

Les calculs ont été réalisés dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT), en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel complet (Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave, FP-LAPW), telle

qu'implémentée dans le code **WIEN2k**. L'optimisation structurale a été effectuée à l'aide de la fonctionnelle d'échange-corrélation de type GGA-PBE.

Les paramètres structuraux à l'équilibre, les constantes élastiques, les modules de compressibilité ainsi que les énergies de formation ont été déterminés avec précision. La stabilité mécanique des composés a été vérifiée à partir des critères de Born–Huang, tandis que leur comportement ductile ou fragile a été évalué à l'aide des différents modules élastiques.

Les propriétés électroniques ont été étudiées à travers les structures de bandes polarisées en spin ainsi que les densités d'états totales et projetées (DOS et PDOS). Cette analyse a permis d'identifier le caractère semi-métallique de plusieurs composés, la présence éventuelle d'un comportement *spin-gapless* ainsi qu'un fort degré de polarisation de spin. Les états magnétiques fondamentaux ont été déterminés en comparant les configurations ferromagnétiques, ferrimagnétiques et paramagnétiques.

Les propriétés vibrationnelles et thermodynamiques ont été analysées dans le cadre du modèle quasi-harmonique de Debye. Les variations de la capacité calorifique, de l'entropie, du coefficient de dilatation thermique et de la température de Debye ont été étudiées en fonction de la température et de la pression, permettant de mieux comprendre la stabilité thermique de ces matériaux.

Les résultats obtenus montrent que les composés de Heusler étudiés présentent une excellente stabilité structurale, une bonne stabilité mécanique ainsi que des propriétés électroniques et magnétiques particulièrement prometteuses. Ces caractéristiques font de ces matériaux des candidats potentiels pour des applications avancées en spintronique, en électronique de spin, dans les capteurs magnétiques et dans les technologies énergétiques de nouvelle génération.

Abstract :

In this thesis, the structural, elastic, electronic, magnetic, vibrational, and thermodynamic properties of the Heusler alloys **Pr_2RhZ, Pr_2CoZ, Ir_2ScZ, Rn_2MnZ**, together with the quaternary Heusler compound **CrPrCoZ** (where **Z = Al, Ga, In, Ge, Sb, Sn,** or **Te**), were systematically investigated. These materials belong to the family of rare-earth- and transition-metal-based Heusler compounds, which have attracted considerable interest owing to their remarkable physical properties and potential applications in spintronic technologies.

The calculations were performed within the framework of Density Functional Theory (DFT) using the Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method as implemented in the **WIEN2k** package. Structural optimization was carried out using the Generalized Gradient Approximation in the Perdew–Burke–Ernzerhof (GGA-PBE) exchange–correlation functional.

The equilibrium lattice parameters, elastic constants, bulk moduli, and formation energies were accurately determined. Mechanical stability was verified according to the Born–Huang stability criteria, while the elastic moduli were employed to assess the ductile or brittle nature of the investigated compounds.

The electronic properties were analyzed through spin-polarized band structures together with the total and projected densities of states (DOS and PDOS). This analysis enabled the identification of half-metallic and spin-gapless semiconducting behaviors, as well as high spin polarization in several compounds. The magnetic ground states were established by comparing ferromagnetic, ferrimagnetic, and paramagnetic configurations. Furthermore, the calculated total and atomic magnetic moments of several compounds obey the Slater–Pauling rule, confirming their highly spin-polarized nature and well-defined integer magnetic moments.

The vibrational and thermodynamic properties were investigated within the quasi-harmonic Debye model. The temperature- and pressure-dependent evolution of the heat capacity, entropy, thermal expansion coefficient, and Debye temperature was examined to evaluate the thermal stability of the materials and to provide insight into lattice dynamics, anharmonic effects, and phonon-mediated heat transport relevant to thermoelectric and magnetocaloric applications.

Overall, the obtained results demonstrate that the investigated Heusler compounds exhibit excellent structural stability, robust mechanical behavior, and outstanding electronic and magnetic properties. Their high spin polarization, half-metallic character, favorable thermodynamic stability, and stable magnetic ordering make them promising candidates for next-generation spintronic devices, magnetic sensors, thermoelectric systems, magnetocaloric technologies, and other advanced energy-related applications.

المشرف | **نائب العميد بما بعد التدرج والبحث العلمي والعلاقات الخارجية** | **العميد**