

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la recherche
Université 8 mai 1945 Guelma

Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études
Master



Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Présenté par : HAFIDIA HALIMA

Intitulé

**Étude des propriétés structurales, magnétiques et magnéto-optiques
du Fe Ni**

Sous la Direction de : BEAMARA OUARDA

Juin 2019

Remerciement

Je tiens à remercier tout d'abord Dieu le tout puissant de m'avoir donné la force et la volonté d'accomplir ce travail.

Ce travail de mémoire a été effectué dans le laboratoire de recherche physique a universitaire 8mai 1945 Guelma .je remercier sincèrement ***Boufelfel Ahmed*** de m'avoir gentiment accueilli dans ce laboratoire.

En premier lieu, je remercier encadreur M: ***BENAMARA OUARDA*** pour sa disponibilité, sa patience, ses précieux conseil set son aide qui ont contribué à orienter et à réaliser notre recherche et notre réflexion durant toute la période du travail.je remercie pour ses conseils et ses qualités humaines, ses discussions scientifiques et fructueuse.

Je remercie Monsieur ***ZANNAT KAMEL***, Professeur 'Pr' à l'université 8 mai 1945 Guelma , je le remercie également pour sa disponibilité permanente et son soutien durant ces trois années.

Enfin ,je présente mes remerciements et reconnaissances à mes parents et ma sœur pour leur encouragement , je remercie aussi mes amies et mes collègues du laboratoire.

Dédicace

Je dédie ce travail à :

*Mon père : En signe de reconnaissance de
l'immense bien que vous avez fait pour moi
concernant mon éducation qui aboutit
aujourd'hui à la réalisation de cette étude.*

Toute ma gratitude et mes profonds

sentiments. Que Dieu le tout puissant soit à

vos côtés et vous accord une meilleure santé.(Amen)

*Ma mère : pour m'avoir donnée la vie et la
joie de vivre. T'abonne éducation, tes*

conseils et tes bénédictions n'ont jamais fait

défaut. Que Dieu le tout puissant soit à vos

côtés et vous accorde une meilleure santé. (Amen)

Ma sœur et Mes frères : Que Dieu garde les pour moi

Toute ma famille.

Toutes mes amies.

Résumé

Dans ce travail nous avons effectué une étude théorique en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (**FP-LAPW**), basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**) implémenté dans le code **Exciting**.

pour déterminer les propriétés structurales, électroniques, magnétique et magnéto-optiques de composant **FeNi** pour deux structures (**FCC**, **L10**).

le potentiel d'échange et corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé (**GGA PBE SOL**). les propriétés structurales à savoir les paramètres de maille, est rapproché à les résultats expérimentaux.

Les résultats obtenus pour la structure de bandes et les densités des états (**DOS**) montrent que FeNi est un métal.

Pour la structure magnétique, on trouve que le composé à étudier est une ferromagnétique, les moments magnétique obtenue sont en bon accord avec les résultats théoriques.

Pour les propriétés magnéto-optiques, l'angle de **Kerr** se présente dans l'intervalle visible (6.2 eV), les deux structures, on a un angle de -0.23° et 0.30° pour **FCC** et **L10** respectivement.

Abstract

In this work, we carried out a theoretical study using the enhanced and linearized plane wave methods (FP-LAPW), based on the density functional theory (DFT) implemented in the **Exciting** code, to determine the structural, electronic properties, Magnetic and magneto-optical FeNi compounds for two structures (FCC, L10).

The exchange potential and correlation is processed by the generalized gradient approximation (GGA PBE SOL). the structural properties, namely the mesh parameters, are compared with the experimental results.

The results obtained for the band structure and the densities of the states (DOS) show that my component is a metal. For the magnetic structure, it is found that the element to be studied is a ferromagnetic, the magnetic moments obtained are in good condition. agree with the experimental results.

For magneto-optical properties, the Kerr angle is in the visible range (6.2 eV), and has an angle of -0.24° and 0.31° for FCC and L10 respectively.

الملخص

في هذا العمل ، أجرينا دراسة نظرية باستخدام أساليب الموجة المعززة والخطية (FP-LAPW) ، بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) المنفذة في الكود Excitig ، لتحديد الخصائص البنيوية والإلكترونية ، مركبات FeNi المغناطيسية والمغناطيسية - البصرية للبنيتين (L10 ، FCC) ، تتم معالجة إمكانية التبادل والترابط بواسطة تقريب التدرج المعمم (GGA- PBE- SOL). تتم مقارنة الخصائص البنيوية ، وهي قريبة مقارنة مع النتائج التجريبية.

أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها عن بنية الشريط وكثافة الحالات (DOS) أن المكون عبارة عن معدن ، وبالنسبة للبنية المغناطيسية ، فقد وجد أن المركب الذي تمت دراسته هو مغناطيسي حديدي ، والعزوم المغناطيسية التي تم الحصول عليها تتفق مع النتائج التجريبية.

بالنسبة للخواص المغناطيسية البصرية ، يكون زاوية Kerr في النطاق المرئي (6.2 eV) ، وهما البنيتين ، أحدهما لها زاوية -0.23° و 0.30° في البنيتين FCC و L10 على التوالي.

Table de Matière

Introduction general.....	1
Chapitre I Généralité sur FeNi.....	
I-1 Introduction	3
I-2 Ferromagnétisme.....	3
I-3 Structures magnétiques.....	4
I-4 Aimantation sous champ lentement variable.....	5
I-5 Des applications industrielles des alliages	7
I-6 Conclusion.....	8
Bibliographie.....	10
Chapitre II Formalisme théorique et méthode de calcul.....	
II-1 Introduction	11
II-2 Equation de Schrödinger d'un cristal.....	11
II-3 L'approximation de Born-Oppenheimer.....	12
II-4 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)	12
II-5 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn	13
II-6 L'équation de Kohn et Sham	14
II-7 L'approximation de Hartree – Fock.....	15
II-8 Les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation	16
II-8-1 L'approximation de la densité locale (LDA)	16
II-8-2 L'approximation du Gradient Généralisé (GGA)	16
II-8-3 L'approximation du Perdew-Burke-Ernzerh (GGA-PBE)	17
II-9 La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW)	17
II-9-1 L'Approximation muffin-tin.....	17
II-9-2 Méthode des ondes planes.....	18
II-9-3 La méthode des ondes planes augmentées (Apw).....	18
II-9-4 La méthode LAPW.....	20
II-10 Conclusions	20
Bibliographie.....	22

Chapitre III Les propriétés magnéto-optiques.....	
III-2 L'optique classique –Equations de Maxwell.....	24
III-3 Etats de polarisation	25
III-3-1 Polarisation rectiligne	26
III-3-2 Polarisation elliptique	26
III-3-3 Polarisation circulaire	27
III-4 Les effets magnéto-optiques	28
III-5 L'effet Kerr	28
III-5.1 L'effet Kerr polaire (P-MOKE).....	29
III-5.2 L'effet Kerr longitudinal (L-MOKE).....	30
III-5.3 L'effet Kerr transversal (T-MOKE).....	31
III-6 L'effet Faraday.....	32
Bibliographie.....	34
Chapitre IV Résultats et discussions.....	
IV-1 Introduction.....	34
IV-2 Détail de calcul.....	35
IV-2-1 Teste de convergence.....	35
IV.3 Propriétés structurales.....	35
IV-4 Propriétés électroniques et magnétiques.....	37
IV-5 Propriétés magnéto- optiques.....	40
Bibliographie.....	43
Conclusion général	44

Liste de figure

Figure I.1 : Comportement ferromagnétique.....	3
Figure I.2 :Structure magnétique idéalisée dans un matériau poly cristallin.....	4
Figure I.3 :Variation de l'induction B avec le champ appliqué H dans un matériau ferromagnétique	6
Figure I.4 :Diagramme de phase des alliages binaires FeNi	6
Figure I.5 : Micrographies MEB des poudres Fe50Ni50 pour différents temps de broyage	7
Figure II.1 : Le cycle auto-cohérent de la résolution des équations de KS et DFT..	13
Figure II.1 :Sphère de Mufin-tin.....	19
Figure III-1 : configuration de la polarisation rectiligne.....	26
Figure III-2 : configuration de la polarisation elliptique.....	27
Figure III-3 : configuration de la polarisation circulaire.....	27
Figure III-4 : configuration de l'effet Kerr Polaire.....	29
Figure III-5 : l'effet Kerr longitudinal.....	30
Figure III-6 : L'effet Kerr transversal.....	31
Figure IV.1 : <i>la convergence de l'énergie totale en fonction de nombre de points K_{point} et $rgkmax$ pour :a) CFC ;b) L_{10}.</i>	35
Figure IV.2 : a) structure FeNi-CFC ;b) structure FeNi $-L_{10}$.	36
Figure IV.3 : la variation de l'énergie en fonction du volume ;a) pour L_{10} , b) CFC.	37
Figure IV.4 : Structure de bandes du FeNi ; a) CFC ; b) L_{10}	38
Figure IV.5 : Densité d'état total (DOS) et partiel (PDOS) du CFC.....	39
Figure IV.6 : Densité d'état total (DOS) et partiel (PDOS) du L_{10}	39
Figure IV.7 : <i>Spectre de Kerr de FeNi CFC $\theta_k = (6.14 \text{ eV}, -0.30^\circ)$, $\gamma_k = (4.9 \text{ eV}, 0.24^\circ)$</i>	41
Figure IV.8 : <i>Spectre de Kerr de FeNi L_{10} ;$\theta_k = (6.21 \text{ eV}, -0.23^\circ)$ et $\gamma_k = (5.57 \text{ eV}, 0.17^\circ)$</i>	42

Liste de tableaux

Tableau I.1 : quelque application de l'alliage Fe-Ni suivant leurs propriétés magnétiques	7
Tableau IV.1 : Données structurales pour l'élément FeNi ; L10 et CFC.....	37
Tableau IV.2 : valeurs du moment magnétique total et partiel.....	40
Tableau IV.3 : les transitions interbandes pour l'élément FeNi.....	41

Introduction général

Récemment les matériaux magnétiques nanocristallins ont été intensivement étudiés en raison de leurs propriétés remarquables à savoir l'aimantation à saturation, le champ coercitif, la température de l'ordre magnétique et le champ magnétique hyperfin.

Les alliages NiFe sont connus depuis longtemps et sont ainsi utilisés dans beaucoup d'applications industrielles pour lesquelles une aimantation à saturation élevée et un champ coercitif faible sont souhaités [1].

L'intérêt trouvé dans ces alliages magnétiques nanostructurés provient de leurs propriétés structurales et chimiques qui sont importantes dans la détermination de leurs propriétés magnétiques [2].

De plus, ces nanomatériaux sont d'un grand intérêt pour la recherche en magnétisme puisque la réduction de la taille des grains vers l'échelle du domaine magnétique offre la possibilité d'éliminer l'influence des parois en domaine et par conséquent ouvre le champ de recherche pour de nouveaux nanomatériaux magnétiquement doux [3].

L'importance économique des FeNi à usages spéciaux est plus grande que leur tonnage (production mondiale 12 000 t/an) ne le laisse croire. Ils représentent environ 4 % en chiffre d'affaires (CA) du marché des produits magnétiques qui est dominé par les matériaux pour l'enregistrement magnétique (environ 50 % du CA) et, dans une moindre mesure, les aimants (environ 10 %)[4].

Nous avons organisé ce mémoire en quatre chapitres :

Le chapitre 1 est tout d'abord consacré à la description générale du matériau doux «cristallins» FeNi et de leurs différentes caractéristiques intrinsèques et propriétés magnétiques. Leurs propriétés fondamentales et leurs principaux domaines d'application sont décrits. Nous avons consacré le deuxième chapitre au formalisme théorique et les méthodes de calcul. Nous résumerons le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui sous tend ce travail ainsi que le Principe de la méthode FP-LAPW.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons les propriétés magnéto-optiques : effet Kerr (polaire, longitudinal et transversal). Le quatrième chapitre sera consacré aux résultats obtenus sur Les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et magnéto-optiques dans les deux structure FCC et L_{10}

Bibliographie

- [1] B. Gehrmann, J. Magn. Magn. Mater, 290–291 (2005) 1419-1422.
- [2] M. E. McHenry, M. A. Villard, D. E. Laughlin, Prog. Mater. Sci. 44 (1999) 291- 33.
- [3] M. Pekala, D. Olezak, E. Jartych, J. K. Zurawicz, J. of Non Crystalline. Solids 250-252 (1999) 757-761.
- [4] G. Couderchon; Alliages fer-nickel et fer-cobalt – Propriétés magnétiques. Techniques de l'ingénieur ; Réf : D2130 V1.1994

Chapitre I

Généralité sur FeNi

I-1 Introduction

On peut schématiquement diviser les matériaux magnétiques doux en deux grandes catégories :

- Ceux utilisés dans les **machines qui transforment l'énergie** : ce sont les alliages fer-silicium (FeSi), utilisés principalement dans l'électrotechnique de puissance ;
- Ceux utilisés dans le **traitement des signaux électriques** : ce sont les alliages spéciaux et les ferrites doux ; on les trouve dans des applications très diverses;

Les alliages fer-nickel (FeNi) constituent le prototype de ces matériaux aux propriétés magnétiques très variées.

I-2 Ferromagnétisme

Tous les éléments chimiques sont magnétiques (généralement para- ou diamagnétiques), c'est une conséquence de leur structure électronique ; mais très peu sont ferromagnétiques.

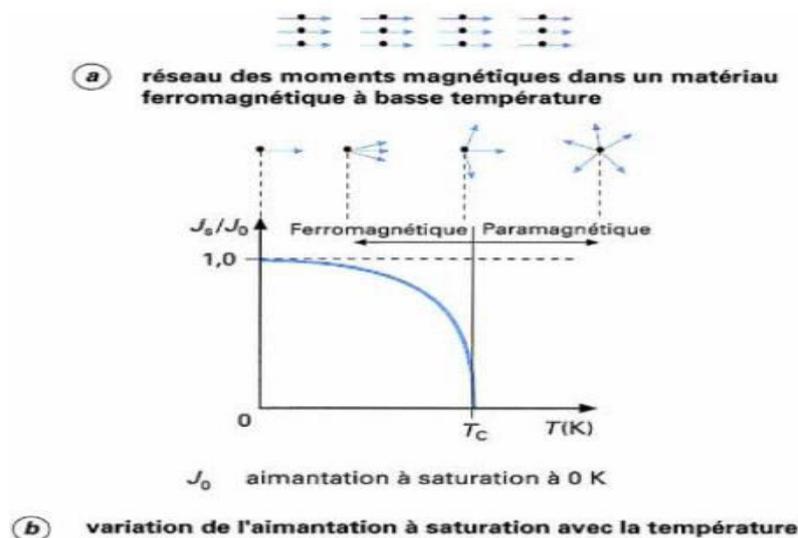


Figure I.1 : Comportement ferromagnétique[1].

Cette forme de magnétisme coopératif exceptionnelle n'existe aux températures ambiantes que pour le fer, le cobalt et le nickel. En effet, dans ces derniers éléments, les moments magnétiques atomiques, au lieu de s'ignorer et de donner un magnétisme statistiquement très faible (le paramagnétisme), se couplent

parallèlement entre eux conduisant ainsi à une très grande valeur de l'aimantation J (figure I.1).

Cet alignement des moments magnétiques, parfait au zéro absolu, est progressivement perturbé par l'agitation thermique qui réussit à le détruire complètement à la température de Curie T_c . Au-delà de cette température, les ferromagnétiques deviennent paramagnétiques.

Le réseau des moments magnétiques, comme tous les réseaux cristallins, est anisotrope ; toutefois, l'anisotropie magnéto-cristalline est souvent plus intense que celle des autres propriétés physiques et joue un rôle très important sur les propriétés macroscopiques des matériaux. On la caractérise par la **constante** d'anisotropie magnéto-cristalline K_1 .

Sous certaines conditions, on peut induire, par traitements sous champ, une anisotropie uni-axiale K_u qui peut se superposer à K_1 .

Une autre manifestation du ferromagnétisme est la magnétostriction qui déforme légèrement le réseau cristallin et permet de rendre compte des interactions magnéto-élastiques. Elle se caractérise par les coefficients de magnétostriction λ_{111} et λ_{100}

I-3 Structures magnétiques

L'idée que l'on se fait de la structure magnétique des matériaux poly-cristallin découle directement des observations pratiquées sur les monocristaux. Sur une plaquette monocristalline convenablement taillée, on observe en effet des régions aimantées alternativement dans un sens et dans l'autre (domaines de Weiss).

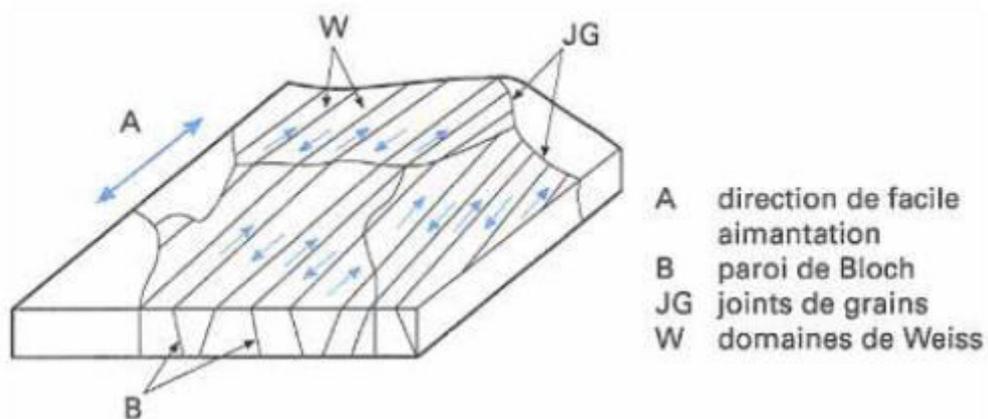


Figure I.2: Structure magnétique idéalisée dans un matériau poly cristallin [1].

Ces régions sont séparées par des zones de transition où l'aimantation tourne graduellement d'une des directions vers l'autre : ce sont les parois de Bloch.

Les matériaux poly-cristallins réels, qui sont constitués d'assemblages de grains monocristallins, devraient nous fournir un spectacle semblable (figure I.2). En fait, cette situation idéale ne se rencontre guère que dans les tôles de l'alliage FeSi à grains orientés où tous les grains de la tôle ont une orientation très voisine. Les structures se compliquent considérablement quand l'orientation des grains entre eux et par rapport aux surfaces libres du solide devient quelconque.

Il apparaît alors, sur les surfaces (joints de grains, surfaces du solide, interfaces des impuretés, etc.), des masses magnétiques qui contraignent le matériau à prendre des configurations locales plus complexes, mais qui minimisent l'accroissement de son énergie potentielle.

Il se crée par exemple des domaines de fermeture qui évitent l'apparition de pôles magnétiques énergétiquement défavorables, en refermant les lignes d'induction dans la matière magnétique [1]

I-4 Aimantation sous champ lentement variable

L'aimantation macroscopique d'un matériau magnétique désaimanté est nulle. Si on le soumet à un champ d'excitation, son induction ; dans la direction du champ croît d'abord en suivant une courbe de première aimantation (figure I.3) ; ensuite, quand le champ d'excitation oscille entre $-H_m$ et $+H_m$, le point figuratif de la fonction $B(H)$ décrit un cycle d'hystérésis (figure I.3).

Pour caractériser rapidement les **performances des matériaux magnétiques**, on utilise les grandeurs suivantes :

- la perméabilité relative avec $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{Hm}^{-1}$ en SI ;
- l'induction rémanente B_r , induction résiduelle en champ nul après aimantation ;
- le champ coercitif H_c , champ nécessaire pour annuler l'induction ou l'aimantation macroscopique ;
- les pertes p , qui correspondent à l'énergie dissipée dans le matériau au cours d'un cycle ; elles dépendent évidemment de la valeur des excursions d'induction et de la vitesse à laquelle on parcourt le cycle.

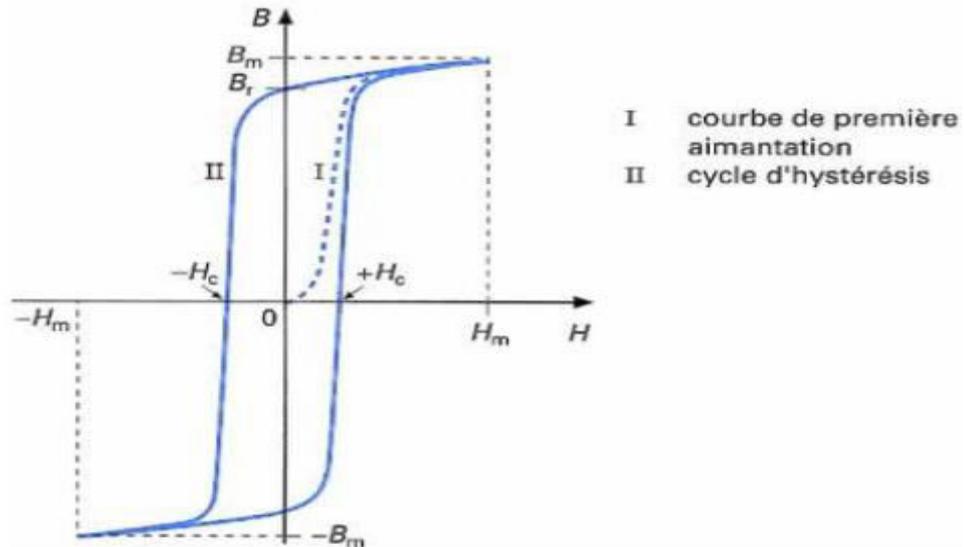


Figure I.3: Variation de l'induction B avec le champ appliqué H dans un matériau ferromagnétique [1].

I-5 Diagramme de phase et ses conséquences.

Le fer et le nickel sont deux éléments proches dans la classification périodique. Leurs atomes présentent certaines similitudes (rayons atomiques voisins, structures électroniques semblables...) qui expliquent en partie le diagramme de phase très simple des FeNi (figure I.4).

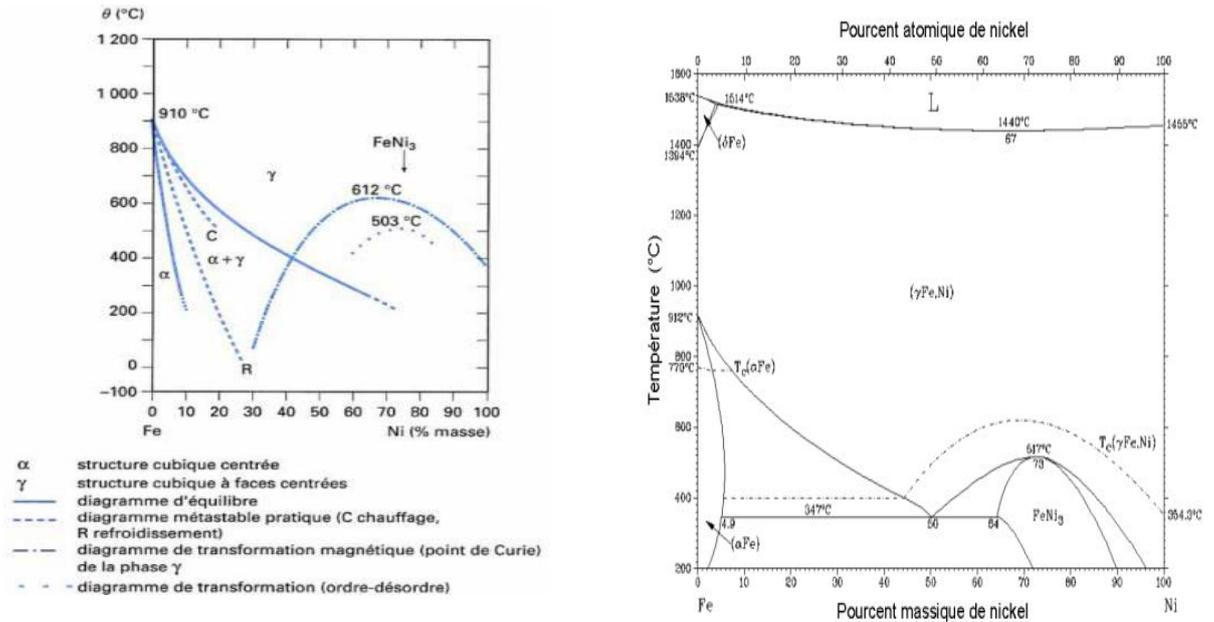


Figure I.4: Diagramme de phase des alliages binaires FeNi [1,3].

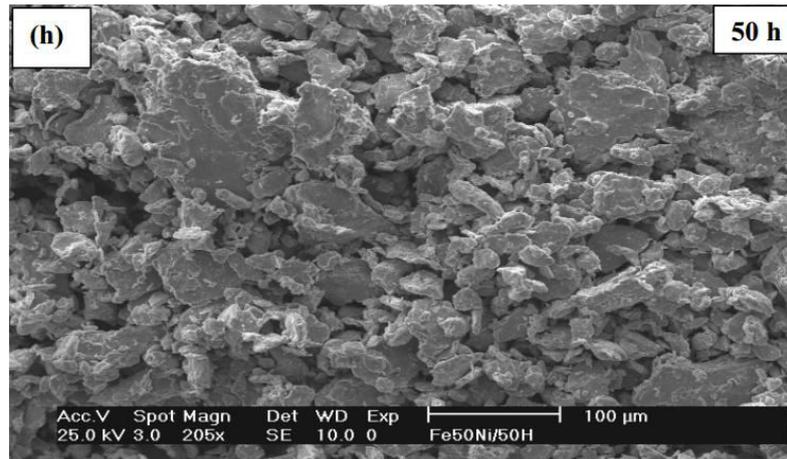


Figure I.5: Micrographies MEB des poudres Fe50Ni50 pour différents temps de broyage [2].

I-6 : Des applications industrielles des alliages FeNi

On peut distinguer trois grandes applications des alliages FeNi :

- ✚ Les alliages pour l'électrotechnique miniaturisée, utilisés sous formes des fils, des bandes d'épaisseurs de 0.1 à 2 mm, des grilles...etc ;
- ✚ Les alliages à très hautes perméabilités, généralement des bandes de faibles épaisseurs et sous forme de circuits bien traités ;
- ✚ Les alliages à cycles hystérésis spéciaux, que l'on retrouve principalement dans le domaine de l'électronique, tel que les dispositifs de sécurité.

Le tableau ci-dessous résume quelques applications de l'alliage Fe-Ni suivant leurs propriétés magnétiques.

Tableau I.1 : quelque application de l'alliage Fe-Ni suivant leurs propriétés magnétiques [3].

Domaine	Type du Fe-Ni	Applications
Horlogerie	Fe-80Ni	Le stator du moteur pas à pas, Les noyaux magnétiques

Blindage électromagnétique	Fe-50Ni	Des tôles sandwich pour la protection contre les spectres électromagnétiques
Domaine de l'automobile	Fe-50Ni	Les capteurs mesurant le positionnement précis des roues
	Fe-36Ni	- Les alliages réfractaires pour les joints de culasses - Injecteurs pour automobile
Electronique	Fe-80Ni (Permalloy)	- La réalisation des profils destinés à divers composants magnétiques et modems, filtres de téléphonie mobile...
	Fe-41Ni	Les supports des circuits intégrés, les pièces de canons à électrons TVC, condensateurs.....
Applications particulières de l'Invar (Prix Nobel 1920)	Fe-36Ni	Les cuves de méthaniers, les pipes pour transfert de fluides cryogéniques, les moules des coques composites des avions (Boeing et Airbus) et spatiaux, les boîtiers de composants électroniques, les armatures de télescope spatial, les dissipateurs thermiques, les pièces de machines-outils, etc.

I-7: Conclusion

Nous avons présenté dans ce premier chapitre, des généralités sur les alliages métalliques de type Fe-Ni. D'après la recherche bibliographique établie, il apparaît que

le système Fe-Ni à des propriétés physiques importantes selon les valeurs de concentration en Fer et en Nickel.

Nous avons présenté de manière simple et générale les notions et concepts de base relatifs au magnétisme et aux propriétés magnétiques des matériaux ferromagnétiques doux poly-cristallins.

Une attention particulière a été portée sur les effets de la température sur les propriétés magnétiques et électriques générales des FeNi. Enfin, nous avons passé en revue les principales applications de ces alliages.

Bibliographie

- [1] M. Pekala, D. Olezak, E. Jartych, J. K. Zurawicz, *J. of Non Crystalline. Solids* **250-252** (1999) 757-761.
- [2] M.A. R. Guitoum, « *étude de propriété structurale, microstructurale et magnétique des nanoparticules* », thèse de doctorat, université Ferhat Abbas, Stif, (2008).
- [3] M. Daamouche, « *études magnétique et structural des alliages Electrolytiques de type $Ni_{1-x}Fe_x$* », thèse de doctorat, université El-Hadjar Lakhdar, Batna 1, (2017) .

Chapitre II

Formalisme théorique et méthode de calcul

II-1 Introduction

Au début du XXIème siècle, les physiciens découvrent que les lois de la mécanique classique ne permettent pas de décrire le comportement de petites particules telles que les électrons [1]. Les propriétés physiques d'un système solide, illustrées par l'image d'électrons légers en mouvement autour de noyaux lourds [2]. 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 ; parmi les méthodes qui existent : les méthodes ab-initio. Ces méthodes permettent de déterminer les grandeurs physiques et chimiques d'un système telles que sa structure électronique et son énergie d'ionisation. Elles reposent sur les fondements de la mécanique quantique et ne font 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 [3].

II-2 Equation de Schrödinger d'un cristal

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 [4]

$$\hat{H}\Psi(r, R) = E \Psi(r, R) \quad (II.1)$$

Où r et R sont, respectivement les positions dans l'espace des électrons et des noyaux, $\Psi(r, R)$ est la fonction d'onde, H est l'hamiltonien du cristal et E est l'énergie totale du Crystal.

Un solide est une collection de particules lourdes chargées positivement (noyaux) et de particules légères chargées négativement (électrons). Si nous avons N noyaux, nous sommes confrontés à un problème de (N+ZN) particules en interaction électromagnétique. C'est un problème à plusieurs corps. L'hamiltonien exact pour ce système est :

$$\hat{H}_T = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{nn} + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{ee} \quad (II.2)$$

Où (\hat{T}_n, \hat{T}_e) sont les énergies cinétiques des électrons et des noyaux, \hat{V}_{nn} l'énergie potentielle d'interaction noyaux-noyaux, \hat{V}_{ne} l'énergie potentielle d'interaction électrons-noyaux et \hat{V}_{ee} l'énergie potentielle d'interaction électron-électron [5].

Les valeurs propres de l'équation (II.1) ne peuvent être calculées de façon exacte que dans le cas des systèmes hydrogénoïdes. Dans le cas d'un système poly-électronique, à cause des interactions électroniques, il n'existe pas de solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger. Afin de trouver des états propres approximatifs acceptables, nous avons besoin de faire des approximations. La première approximation qui peut être introduite est l'approximation de Born-Oppenheimer [6].

II-3 L'approximation de Born-Oppenheimer

Vu que les électrons ont une masse très faible devant celle des noyaux ($\frac{m_n}{m_p} = \frac{1}{1836}$) et une vitesse largement plus grande, la résolution des équations se fait en considérant les noyaux immobiles. Cette approximation, dite adiabatique, a pour but de simplifier l'équation Schrödinger [7]. La fonction d'onde totale est séparée en deux parties, la partie électronique (les électrons) et la partie nucléaire (les noyaux) :

$$\hat{H}_{elec} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{Ne}, \text{ et } \hat{H}_{nayaux} = \hat{T}_N + \hat{V}_{NN} \approx \hat{V}_{NN}$$

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.

II-4 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

Les bases de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont été élaborées en 1927 par Thomas [7,8] et Fermi [9,10] qui calculèrent l'énergie d'un atome en représentant son énergie cinétique en fonction de la densité électronique. En 1928, Dirac [11] introduit le terme d'échange prédit par Hartree mais il n'y a toujours aucune prise en compte de la corrélation électronique qui fût finalement ajoutée par Wigner. Dans ce modèle, les n électrons dépendants de $3n$ coordonnées d'espace sont remplacés par leur densité $\rho(\vec{r})$ qui ne dépend plus que de 3 variables.

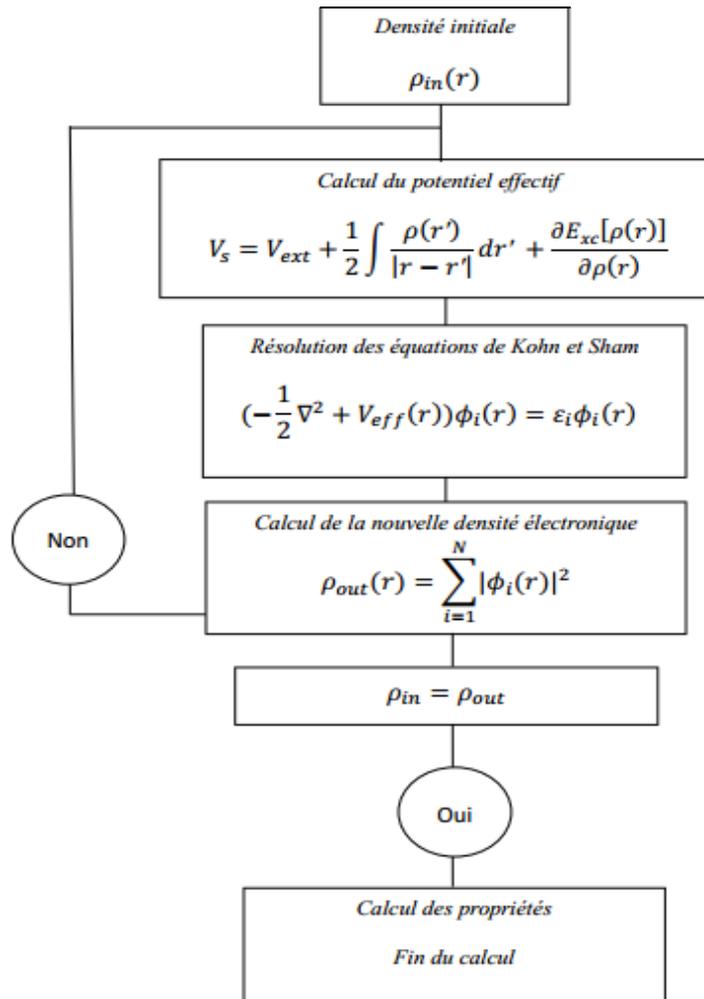


Figure II.1 : Le cycle auto-cohérent de la résolution des équations de KS et DFT.

II-5 Les théorèmes de Hohenberg-Kohn

L'état fondamental du système est décrit par la fonction d'onde $(\psi_o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n))$ qui correspond à une unique densité électronique $(\rho_o(\vec{r}))$. Cette fonction d'onde, et l'énergie E_0 qui lui est associée, sont déterminées par la minimisation de l'énergie totale du système. Le potentiel externe $\hat{V}_{exte}(\vec{r})$ créé par les N noyaux du système est alors complètement déterminé et fixe donc l'hamiltonien. Ainsi, le nombre d'électron n et le potentiel $\hat{V}_{ext}(\vec{r})$, définissent toutes les propriétés de l'état fondamental.

En 1964, Hohenberg et Kohn [12] légitiment l'utilisation de la densité électronique comme variable en démontrant qu'un état fondamental non dégénéré sous un potentiel extérieur $\hat{V}_{ext}(\vec{r})$ donné, il ne peut lui être associé qu'une densité électronique $\rho(\vec{r})$ unique. Ainsi, l'énergie de l'état fondamental peut être définie

comme une fonctionnelle de (\vec{r}) , ce qui en principe permet de déterminer toutes les propriétés de l'état fondamental. Cette énergie peut alors s'écrire :

$$E[\rho] = \underbrace{\hat{T}[\rho] + \hat{V}_{ee}[\rho]}_{\hat{F}_{HK}[\rho]} + \int \rho(\vec{r}) \hat{V}_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (II.3)$$

Le terme $\hat{F}_{HK}[\rho]$ est indépendant du potentiel externe $\hat{V}_{ext}(\vec{r})$ et constitue donc la fonctionnelle universelle de la densité $\rho(\vec{r})$. Le terme $\hat{T}[\rho]$ représente l'énergie cinétique des électrons et $\hat{V}_{Ne}[\rho]$ exprime l'interaction électrons / noyaux. Le potentiel $\hat{V}_{ee}[\rho]$ peut-être décomposé sous la forme d'une somme d'un terme classique de répulsion coulombienne $\hat{J}[\rho]$ et un terme non-classique d'échange-corrélation très important mais également très difficile à évaluer [13].

II-6 L'équation de Kohn et Sham

L'approche de Kohn-Sham [14] 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 $\hat{V}_{eff}(\vec{r})$ 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 qui vérifie :

$$\hat{h}_{KS}\phi_i = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \hat{V}_{eff}(\vec{r}) \right] \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (II.4)$$

L'hamiltonien total de ce système est donc :

$$\hat{H}_{KS} = \sum_i^n \left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 \right) + \sum_i^n \hat{V}_{eff}(\vec{r}_i) \quad (II.5)$$

L'énergie cinétique de ce système est donnée par :

$$\hat{T}_{KS}[\rho] = \left\langle \psi_{KS} \left| \sum_i^n \left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 \right) \right| \psi_{KS} \right\rangle = \sum_i^n \left\langle \phi_i \left| -\frac{1}{2}\nabla_i^2 \right| \phi_i \right\rangle \quad (II.6)$$

La densité électronique associée est donc :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i^n |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (II.7)$$

A partir de l'équation (II.4) on peut alors écrire :

$$\hat{F}_{KS}[\rho] = \hat{T}_{KS}[\rho] + \hat{J}_{KS}[\rho] + \hat{E}_{XC}[\rho] \quad (II.8)$$

Ou :

$$\hat{E}_{XC}[\rho] = (\hat{T}[\rho] - \hat{T}_{KS}[\rho]) + (\hat{V}_{ee}[\rho] - \hat{J}_{KS}[\rho]) \quad (II.9)$$

est l'énergie d'échange-corrélation. Soit, toujours d'après l'équation (II.4) :

$$\hat{E}[\rho] = \hat{T}_{KS}[\rho] + \hat{J}_{KS}[\rho] + \hat{E}_{XC}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) \hat{V}_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (II.10)$$

Toute la difficulté réside désormais dans l'évaluation de l'énergie d'échange-corrélation

$\hat{E}_{XC}[\rho]$ dont l'expression exacte n'est connue que pour un gaz d'électrons libres.

II-7 L'approximation de Hartree – Fock

L'approximation de Born-Oppenheimer montre que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire l'équation stationnaire de Schrödinger [15] :

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (II.11)$$

En remplaçant l'hamiltonien H_e par son expression, la relation (I.5) devient :

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i,\alpha} U_{i\alpha} \right] \psi_e = E_e \psi_e \quad (II.12)$$

Cette dernière équation peut être résolue pour une seule particule. Les interactions n'existant pas entre les électrons $U_{ij} = 0$ on peut décomposer, dans ces conditions, l'équation (II.12) en un système de plusieurs équations. Cependant, il faut trouver un moyen mathématique qui permette de tenir compte des interactions électroniques tout en conservant le système d'électrons indépendant. Dans ce but, Hartree a introduit un champ extérieur dont lequel chaque électron peut se mouvoir indépendamment des autres. Ainsi, l'hamiltonien peut être mis sous la forme suivante :

$$H_e = \sum_{i=1}^n H_i \quad (II.13)$$

Où l'hamiltonien correspondant à l'électron (i) vaut :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + V(\vec{r}_i) + \Omega_i(\vec{r}_i) \quad (II.14)$$

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ Représente l'énergie potentielle d'un électron (i) soumis à l'action du champ moyen produit par tous les autres électrons et $V(\vec{r}_i)$ représente l'énergie potentielle de cet électron dans le champ moyen produit par tous les noyaux du cristal.

Puisque l'hamiltonien ne renferme plus de termes représentant les énergies d'interactions des électrons, la forme de la fonction d'onde totale est le produit de

fonctions d'onde de chacun des électrons. Par conséquent, l'énergie est la somme des énergies de tous les électrons :

$$\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) = \prod_i^n \psi_i(\vec{r}_i) \quad (II.15)$$

$$E_e = \sum_i^n E_i \quad (II.16)$$

II-8 Les approximations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation

II-8-1 L'approximation de la densité locale (LDA)

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

$$\hat{E}_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(\rho) d\vec{r} \quad (II.17)$$

Cette énergie peut être séparée en deux composantes :

$$\hat{E}_{XC}^{LDA}[\rho] = E_X^{LDA}(\rho) + E_C^{LDA}(\rho) \quad (II.18)$$

Avec $E_C^{LDA}(\rho) = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \rho(\vec{r}) \right)^{\frac{1}{3}}$ d'après la fonctionnelle d'échange de Dirac. La plus grande source d'erreur en LDA provient du calcul de l'énergie d'échange. L'énergie de corrélation est quant à elle surestimée, mais, dès lors qu'elle ne contribue que faiblement à l'énergie totale, l'erreur est petite. La densité électronique étant considérée comme localement uniforme, les systèmes pour lesquels la densité varie brusquement comme pour les structures ioniques ou moléculaires par exemple ne peuvent être décrits correctement.

II-8-2 L'approximation du Gradient Généralisé (GGA)

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

$$\hat{E}_{XC}^{GGA}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = \int (\rho_\alpha, \rho_\beta, \nabla\rho_\alpha, \nabla\rho_\beta) d\vec{r} \quad (II.19)$$

De même que précédemment, on peut séparer les termes d'échange et de corrélation :

$$\hat{E}_{XC}^{GGA}[\rho, \nabla\rho] = E_X^{GGA}(\rho, \nabla\rho) + E_C^{GGA}(\rho, \nabla\rho) \quad (II.20)$$

L'utilisation des fonctionnelles de type GGA permet d'accroître de façon significative la précision des calculs en comparaison avec la description fournie par la LDA en particulier pour les énergies totales, les énergies de cohésion, les volumes à l'équilibre et les modules d'incompressibilité.

II-8-3 L'approximation du Perdew-Burke-Ernzerh (GGA-PBE)

L'approximation PBE [16] est la nouvelle version de l'approximation GGA dont l'énergie d'échange peut être déterminée comme une intégrale de la densité d'échange :

$$\hat{E}_X^{PBE}(\vec{r}) = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \varepsilon_X^{PBE}(\rho(\vec{r}), s(\vec{r})) \quad (II.21)$$

Tel que :

$$\varepsilon_X^{PBE}(\rho(\vec{r}), s(\vec{r})) = \varepsilon_X^{LDA}(\rho(\vec{r})) \times \hat{F}_X^{PBE}(s(\vec{r})) \quad (II.22)$$

Et :

$$\hat{F}_X^{PBE}(s) = -\frac{8}{9} \int_0^\infty y dy J^{PBE}(s, y) \quad (II.23)$$

Où $J^{PBE}(s, y)$ est la partie d'échange de la fonctionnelle PBE [17].

II-9 La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW)

Il existe différentes méthodes de calculs de structures électroniques pour la résolution des équations de la DFT. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'onde prises comme base. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est l'une des méthodes les plus précises [18].

Dans cette méthode aucune hypothèse de forme particulière n'est faite au niveau du potentiel .

La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (LAPW : linearised augmented plane wave), développée par Andersen [19], est fondamentalement une modification de la méthode des ondes planes augmentées (APW) développée Slater [20], donc avant d'exposer le principe de LAPW, nous allons revoir différents aspects de la méthode APW.

II-9-1 L'Approximation muffin-tin

Dans cette approximation le cristal est divisé en deux régions, dans chaque région le potentiel est représenté d'une façon différente. Une région sphérique ou le

potentiel possède la symétrie sphérique, et une région interstitielle où le potentiel est pris comme constant. Cette approximation donne un outil efficace et simple au même temps, car la résolution de l'équation de Schrödinger se fait dans la région sphérique en coordonnées sphériques, et dans la région interstitielle l'équation admet des ondes planes comme solution, avec une condition aux limites pour assurer la continuité des fonctions d'ondes en traversant la surface sphérique.

II-9-2 Méthode des ondes planes

Cette méthode constitue la base d'un ensemble de méthodes dites ondes planes telles que la méthode des ondes planes orthogonalisées et celle des ondes planes augmentées. Pour résoudre l'équation de Schrödinger, en tenant compte de la périodicité du réseau cristallin, on choisit une forme particulière de la fonction d'onde établie par Bloch :

$$\psi_k(r) = U_k(r)e^{ikr} \quad (II.24)$$

Le choix d'utilisation d'une base d'ondes planes pour les fonctions d'ondes présente de nombreux avantages :

- L'utilisation dans le calcul des éléments de matrice de l'Hamiltonien.
- L'utilisation des transformées de Fourier rapide permettent de passer rapidement de l'espace réel à l'espace réciproque et vice-versa.
- Les ondes planes forment un ensemble complet et orthonormal indépendantes des positions atomiques

Pour le calcul de la relation de la dispersion $E_n(K)$ on fait appel à l'équation circulaire, voir la connaissance de l'expression décrivant le potentiel cristallin est nécessaire.

Ce calcul exige que le nombre d'ondes planes utilisées soit suffisamment grand ce qui rend la tâche difficile, d'où on obtient une faible convergence.

II-9-3 La méthode des ondes planes augmentées (Apw)

La méthode APW (Augmented plane wave méthode), a été proposée par Slater en 1937 [18], en utilisant le potentiel muffin-tin.

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V(\vec{r}) & \text{pour } r < r_s \\ 0 & \text{pour } r > r_s \end{cases} \quad (II.25)$$

Elle est issue du constat suivant : la solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel constant est une onde plane, tandis que pour un potentiel sphérique c'est une fonction radiale. Une façon de décrire un potentiel cristallin de type Muffin-Tin(MT) (figure II.2) [19.20] est donc de diviser l'espace en deux régions :

- 1- une première région (S) constituée de sphères centrées sur chaque site atomique dans lesquelles les fonctions d'ondes seront basées sur des fonctions radiales.
- 2- une seconde région (I), dite interstitielle, se situant entre les atomes et pour laquelle les fonctions de bases sont des ondes planes.

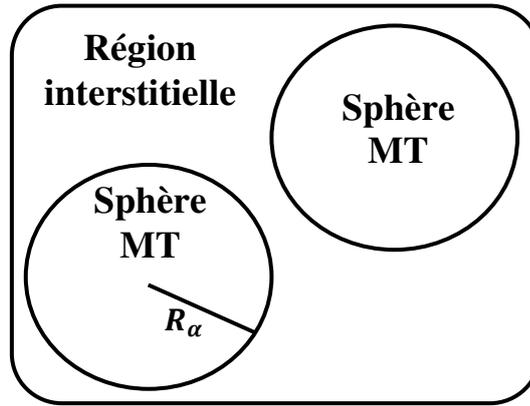


Figure II.2: Potentiel « Muffin-Tin ».

Les deux régions sphériques sont définies par les fonctions d'ondes :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r}, & r > R_a \\ \sum_{lm} A_{lm} Y_{lm}(r) U_{lm}(r), & r < R_a \end{cases} \quad (II.26)$$

Où Ω est le volume de la maille unitaire.

C_G et A_{lm} sont les coefficients de développement.

r : est la position en coordonnées polaires à l'intérieur de la sphère.

K : est le vecteur d'onde dans la zone de Brillouin irréductible.

G : est le vecteur de l'espace réciproque.

$U_l(r)$: est la solution numérique de la partie radiale de l'équation de Schrödinger :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{dr^2} + V(r) - E_l \right\} U_l(r) = 0 \quad (II.27)$$

Avec : $V(r)$ la composante sphérique du potentiel dans la sphère. Les fonctions radiales définies par cette équation sont automatiquement orthogonales à chaque état du même hamiltonien qui disparaît à la frontière des sphères.

II-9-4 La méthode LAPW

Cette méthode consiste d'exprimer les fonctions de base à l'intérieur des sphères comme des combinaisons linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ et de leurs dérivée $\dot{U}_l(r)$ par rapport à l'énergie

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & \in I \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(r) & \in S \end{cases} \quad (II.28)$$

Les fonctions radiales satisfont l'équation :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dU_l}{dr} \right] + \left[\varepsilon - \frac{l(l+1)}{r^2} - V(r) \right] U_l(\varepsilon, r) = 0 \quad (II.29)$$

Tandis que leurs dérivées satisfont l'équation suivante

$$\left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right) r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (II.30)$$

Les coefficients B_{lm} sont déterminés de la même manière que celle utilisée pour obtenir les coefficients A_{lm} . A l'intérieure des sphères les fonctions LAPW décrivent l'état de système mieux que APW. Dans le cas ou E_l diffère un petit peu de l'énergie de bande E .

Une combinaison linéaire peut représenter mieux la fonction radiale, et en peut écrire :

$$U(r) = U_l(\varepsilon, r) + (\varepsilon - E_l) r \dot{U}_l(r) + O((\varepsilon - E_l)^2) \quad (II.31)$$

Mais avec cette procédure on perd un peu la précision des calculs, par rapport à la méthode APW les erreurs commises sur les fonctions d'onde et l'énergie de bande sont de l'ordre de $(\varepsilon - E_l)^2$ et $(\varepsilon - E_l)^4$ et respectivement.

II-10 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu que la théorie de la DFT permet d'approcher la densité électronique de l'état fondamental d'un gaz d'électrons sans avoir à calculer sa

fonction d'onde exacte. Nous avons ensuite présenté les différentes approximations utilisées pour le calcul du potentiel de l'échange et de corrélation. Enfin, nous avons décrits l'approche de FP_LAPW utilisée dans nos calculs DFT.

Bibliographie

- [1] Maylis Orio ; « *étude par DFT des propriétés électronique et magnétique de complexes de Fer. Application aux systèmes de types catalase et Fer –Soufre* », thèse de doctorat, université Joseph Fourier, (2007).
- [2] Benyettou Samia, « *calcul de premier principe de quelque p.phys de quelque alliages s-c* », thèse de doctorat, université Mohamed khider, Biskra, (2016).
- [3] B.H.Ghaouti, « *étude ab-initio des propriétés électroniques et magnétique du semi-conducteur magnétique dilué Li (Zn, Ma, As)* », mémoire de master , université de Abou Bakr Belkaid, Tlemcen, 2017.
- [4] P. Kireev, « *la physique des semi-conducteurs* », 2ième édition, (1975).
- [5] LARDJANE Soumia, « *Etude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du semi-conducteur magnétique dilué : ZnO dopé au Cobalt* ». Thèse de doctorat, Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen, (2013).
- [6] M. Born, R. J. Oppenheimer, *Ann. Phys*, **84**, (1927), 457.
- [7] F. Fischer, M. Keller, T. Gerhard, T. Behr, T. Litz, H. J. Lugauer, M. Keim, G. Reuscher, T. Baron, A. Waag and G. Landwehr, *J.App. Phys. Lett.* , **84**, (1998), 1650.
- [8] L.H. Thomas, *Cambridge Phil. Roy.Soc.*, **23**, (1927), 542.
- [9] K. Wilmers, T. Wethkamp, N. Esser, C. Cobet, W. Richter, V. Wagner, A. Waag, H. Lugauer, F. Fischer, T. Gerhard, M. Keim, and M. Cardona, *Phys. Status Solidi* , **B215**, (1999), 5.
- [10] E. Fermi, *Accad.Naz. Lincei*, **6**, (1927), 602.
- [11] P.M.A. Dirac, *Proc. Roy. Soc*, **123** (1929), 714-733.
- [12] J.A.White and D.M.Bird. , *Pys .Rev. B.*, 50(**70**), (1994), 4957.
- [13] Mostafa Karim BENABADJI, « *Etude de la Stabilité Structurale des Intermétalliques Polaire de type phases de Laves YM2 (M : Ni, Cu, Zn)* ». Thèse de doctorat, Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen (2013).
- [14] W. Kohn and L. J. Sham, *PhysRev* ,**140 (4A)** ,1133 (1965).
- [15] M. Bornet, R. Oppenheimer, *Annealen der Physik*, **Vol. 389**, (1927), 457.
- [16] Jinhua Li, Ningyi Yuan, TaibinXie, Didi Dan, *Adv. Opt. Manuf. Technol*, **61490 B** (2006).
- [17] HAMIDI Nawal, « *Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du semi-conducteur magnétique dilué Alp dopé aux différents métaux de transition* ». Thèse de Magister, Université de Médéa, (2016).

[18] k.hacini, « *etudes des propriete structurales et electronique des alliage quaternaires par le methode de FP-LAPW* », thèse de doctorat, université annaba ,(2012).

[19] O.K. Andersen, *Phys. Rev B* **12**, 3060, (1975).

[20] J.C. Slater, *Phys. Rev*, **51**, 846, and (1937).

*Chapitre III : Les propriétés
magnéto-optiques*

III-1 L'optique classique – Equations de Maxwell

L'interaction des radiations électromagnétiques avec un milieu magnétique est décrite par les équations de Maxwell (en CGS) suivantes :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0} \quad (III.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (III.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad (III.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi\rho \quad (III.4)$$

\vec{B} : L'induction magnétique

\vec{H} : Le champ magnétique macroscopique

\vec{D} : L'induction électrique

ρ : La densité de charge

Sachant que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

$$\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{\nabla} \phi \quad (III.5)$$

Avec \vec{A} et ϕ sont respectivement les potentiels vecteur et scalaire.

Si l'on remplace les expressions de \vec{E} et \vec{B} ci-dessus dans l'équation d'Ampère et en utilisant les identités vectorielles, on aura :

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \quad (III.6)$$

Cette dernière équation a le caractère d'une équation d'onde car elle combine les dérivées secondes de temps et de l'espace. L'équation de Coulomb (III.5) donne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho = -\vec{\nabla}^2 \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \quad (III.7)$$

En utilisant la jauge de Coulomb : $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

On aura : $\vec{\nabla}^2 \phi = -4\pi\rho$

On obtient une relation similaire pour le potentiel vecteur à partir de l'équation (III-3) en utilisant la définition de ce dernier [3].

$$\nabla^2 \vec{A} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (III.8)$$

Les équations de Maxwell sont complétées par d'autres équations appelées équations de matériau, qui introduisent les propriétés spécifiques du matériau à travers la conductivité électrique σ , la permittivité diélectrique ε et la perméabilité magnétique. μ

$$\nabla^2 \vec{A} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j} \vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \quad (III.9)$$

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \quad (III.10)$$

$$\vec{D} = \mu \vec{H} = \vec{H} + 4\pi \vec{M} \quad (III.11)$$

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (III.12)$$

\vec{M} : est l'aimantation.

La conductivité électrique et la constante diélectrique sont des quantités complexes:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \frac{4\pi}{\omega} \sigma_1 \quad (III.13)$$

$$\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2 \quad (III.14)$$

Elles sont reliées par la relation

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma \quad (III.15)$$

Les paramètres d'un matériau tel que ε et σ servent à calculer la charge et le courant des champs en présence de la matière, tandis que l'indice de réfraction \tilde{N} est utilisé pour décrire la propagation des ondes électromagnétique dans un milieu quelconque. L'indice de réfraction est donné par :

$$\tilde{N} = \tilde{n} + i\tilde{\kappa} = \left[\varepsilon_1 \mu_1 + i \frac{4\pi \mu_1 \sigma_1}{\omega} \right]^{1/2} = [\tilde{\varepsilon} \cdot \mu_1]^{1/2} \quad (III.16)$$

III-2 Etats de polarisation

La polarisation est un phénomène provenant du caractère ondulatoire de la lumière. La lumière est une onde qui résulte de la propagation du champ électromagnétique (\vec{E}, \vec{B}) .

Dans une base $\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z$ où \vec{u}_x définit la direction de propagation de l'onde électromagnétique, c.-à-d. $\vec{K} = K\vec{u}_x$

$$\vec{E} = \begin{cases} 0 \\ E_{0y} \cos(\omega t - kx + \varphi_y) \\ E_{0z} \cos(\omega t - kx + \varphi_z) \end{cases} \quad (III.17)$$

On pose $\varphi = \varphi_z - \varphi_y$ on déclenche le chronomètre de telle manière :

$$\vec{E} = \begin{cases} 0 \\ E_{0y} \cos(\omega t - kx) \\ E_{0z} \cos(\omega t - kx + \varphi) \end{cases} \quad (III.18)$$

$$\varphi = 0$$

$$E_{0y} = E_{0z} = E_0$$

Ainsi, en un point de l'espace, \vec{E} peut être assimilé à un oscillateur harmonique

III-2-1 Polarisation rectiligne

Lorsque $\varphi = 0$ ou $\varphi = \pi$

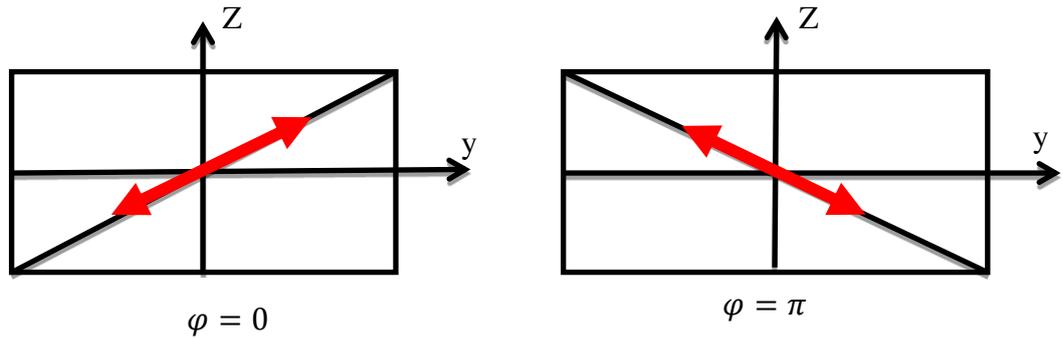


Figure III-1 : configuration de la polarisation rectiligne .

\vec{E} à une direction fixe en tout point de l'espace.

III-2-2 Polarisation elliptique

Elle représente le cas le plus général. Elle est obtenue pour les valeurs suivantes de φ :

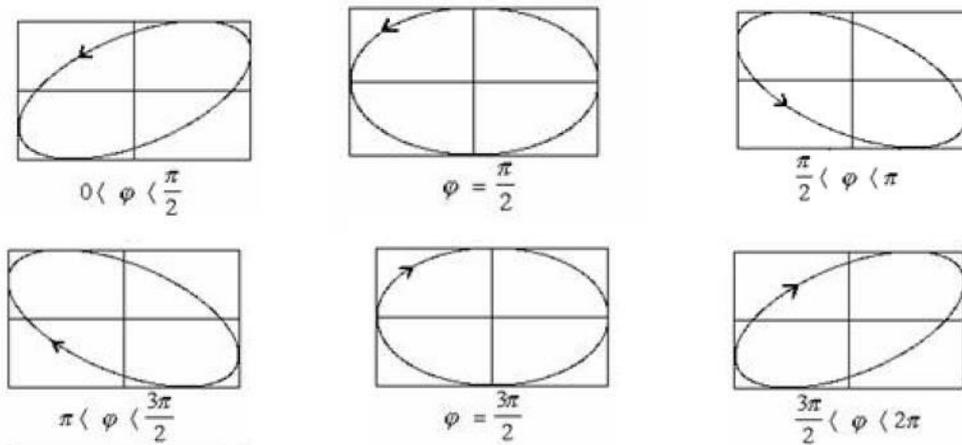


Figure III-2 : configuration de la polarisation elliptique.

Toute polarisation elliptique se décompose en deux ondes rectilignes dont les axes orthogonaux peuvent être pris arbitrairement.

III-2-3 Polarisation circulaire

Elle apparaît lorsque $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ou $\varphi = \frac{3\pi}{2}$ et $E_{0y} = E_{0z} = E_0$



Figure III-3 : configuration de la polarisation circulaire

Dans ce cas \vec{E} tourne à une vitesse angulaire constante.

On a : $\vec{E} = \begin{cases} 0 \\ E_0 \\ E_0 e^{i\varphi} \end{cases}$

Dans le cas d'une de Polarisation circulaire gauche, on a $a\vec{E} = \begin{cases} 0 \\ E_0 \\ iE_0 e^{i\varphi} \end{cases}$, c'est-à-dire

$\vec{E}_z = -i\vec{E}_y$

À noter, toute onde polarisée circulairement peut se décomposer en deux ondes orthogonales polarisées rectilignement.

Et toute onde polarisée rectilignement peut aussi se décomposer en deux ondes polarisées circulairement (gauche et droite).

III-3 Les effets magnéto-optiques

Les effets magnéto optiques résultent de l'interaction des radiations avec des matériaux aimantés spontanément ou soumis à un champ magnétique externe. Cette interaction conduit à deux phénomènes :

- Un changement de l'état de polarisation de la lumière en réflexion ou en transmission qui conduit respectivement à **l'effet Kerr** et **l'effet Faraday**.
- La différence de la section efficace d'absorption des radiations polarisées circulairement à gauche et à droite qui conduit au phénomène de **Dichroïsme circulaire**.

Du point de vue microscopique et dans le domaine visible, les effets magnéto optiques résultent de l'excitation des électrons de la bande de conduction. Dans le domaine des rayons X, ces phénomènes sont dus aux transitions des électrons des niveaux de cœur vers des niveaux de valence. Les effets magnéto optiques ont pour origine, la brisure de symétrie suite à la présence de l'ordre magnétique [4]. Toutefois, ces effets ne peuvent être traités que si l'on tient compte du couplage Spin-Orbite.

III-4 L'effet Kerr

L'effet Kerr magnéto optique MOKE a été découvert par le physicien écossais John Kerr en 1888. Il avait constaté que lorsque la lumière, réfléchiée à la surface d'une substance magnétique après une incidence normale, devient polarisée elliptiquement de sorte que le grand axe de l'ellipse subit une rotation en respectant le plan de polarisation du faisceau incident [5].

En spectroscopie magnéto-optique, on distingue deux modes de polarisation linéaire:

Modes S et P dans lesquels, le champ électrique est orienté respectivement perpendiculairement ou parallèlement au plan d'incidence.

Selon l'orientation de l'aimantation par rapport à la surface et le plan d'incidence, on peut distinguer trois géométries de l'effet Kerr :

III-4.1 L'effet Kerr polaire (P-MOKE)

Sa géométrie est conçue de sorte que le vecteur de l'aimantation soit orienté perpendiculairement à la surface réfléchissante et parallèlement au plan d'incidence, voir figure (III-4).

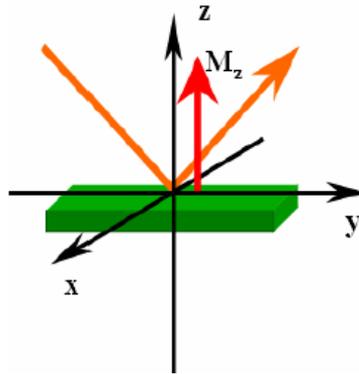


Figure III-4 : configuration de l'effet Kerr Polaire

L'effet Kerr dans sa géométrie polaire est le plus utilisé dans les études théoriques et expérimentales grâce à ces applications technologiques (enregistrements et lecture magnétiques). Puisque toutes les propriétés magnéto-optiques sont liées directement à la conductivité optique, dans un système tétragonal dans lequel l'aimantation est orientée suivant l'axe z, le tenseur de la conductivité est donné par l'expression [6] :

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (III.19)$$

La lumière plane réfléchiée sur une surface métallique d'une couche mince, devient polarisée elliptiquement et son grand axe subit une légère rotation

Dans ces conditions, l'angle complexe de Kerr est donné par la relation [7] :

$$\frac{1 + \tan \eta_k}{1 - \tan \eta_k} e^{i2\theta_k} = \frac{(1 + n_+)(1 - n_-)}{(1 - n_+)(1 + n_-)} \quad (III.20)$$

Où

θ_k est la rotation Kerr

η_k Est L'ellipticité de Kerr

n_{\pm}^2 Sont les valeurs propres du tenseur $\tilde{\sigma}(\omega)$ donné par l'équation. Elles sont données par :

$$n_{\pm}^2 = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} (\sigma_{xx} \pm \sigma_{xy}) \quad (III.21)$$

θ_k, η_k , Pour la plupart des matériaux, sont inférieurs à un degré, la relation (III.20) prend la forme :

$$\theta_k + i\eta_k \approx \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} \sqrt{1 + \left(\frac{4\pi i}{\omega}\right) \sigma_{xx}}} \quad (III.22)$$

III-4.2 L'effet Kerr longitudinal (L-MOKE)

Dans ce cas l'aimantation est orientée parallèlement à la surface de réflexion et au plan d'incidence en même temps, voir figure (III-4).

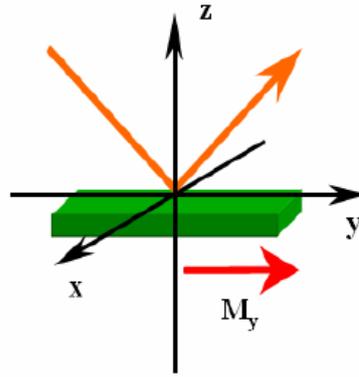


Figure III-5 : l'effet Kerr longitudinal

En utilisant la géométrie L-MOKE, le tenseur diélectrique s'écrit sous la forme

$$\tilde{\varepsilon}(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & \varepsilon_{xz} \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 \\ -\varepsilon_{xz} & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (III.23)$$

L'angle complexe de Kerr est donné par la relation [8]

$$\theta_{S,P}^L + i\eta_{S,P}^L = -\frac{2\varepsilon_{xz} \sin \varphi \cos \varphi \sqrt{\varepsilon_{xx}}}{D} \quad (III.24)$$

Avec

$$D = (\sqrt{\varepsilon_{xx}(\varepsilon_{zz} - \sin^2 \varphi)} + \sqrt{\varepsilon_{zz}(\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi)}) (\sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi} \pm \cos \varphi) (\sqrt{\varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz}} \cos \varphi \mp \sqrt{\varepsilon_{zz} - \sin^2 \varphi}) \quad (III.25)$$

φ : est l'angle d'incidence

Les signes (+) et (-) correspondent respectivement aux polarisations p et s de la lumière incidente.

Dans le cas où $\varepsilon_{xx} \approx \varepsilon_{zz}$, la formule (III-24) devient

$$\theta_{S,P}^L + i\eta_{S,P}^L = - \frac{\varepsilon_{xx} \sin \varphi \sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi} \pm \sin \varphi \tan \varphi}{(\varepsilon_{xx} - 1)(\varepsilon_{xx} - \tan^2 \varphi) \sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi}} \quad (III.26)$$

III-4.3 L'effet Kerr transversal (T-MOKE)

Ce cas est observé lorsque le vecteur de l'aimantation est dirigé perpendiculairement au plan d'incidence figure (III-5).

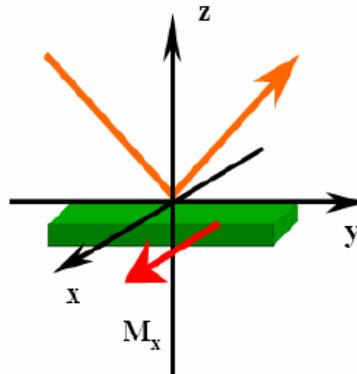


Figure III-6 : L'effet Kerr transversal

Le T-MOKE ne mesure pas la rotation ou l'ellipticité, mais il mesure la différence dans l'intensité de la lumière réfléchi. Il existe uniquement lorsque le mode de la lumière incidente est de type p.

La différence de la réflectivité est donnée par :

$$\delta_K = R_e \left[\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{xz} \sin 2\varphi}{\varepsilon_{xx}^2 \cos^2 \varphi - \varepsilon_0 \varepsilon_{xx} + \varepsilon_0^2 \sin^2 \varphi} \right] \quad (III.27)$$

Le T-MOKE est utilisé essentiellement dans l'étude des propriétés magnétiques notamment l'observation des domaines magnétiques sur les surfaces des matériaux magnétiques.

III-5 L'effet Faraday

en 1845, Michael Faraday a constaté que lorsqu'un bloc de verre est soumis à un champ magnétique, devient optiquement actif. En effet lorsqu'une lumière plane traverse un verre parallèlement au champ magnétique appliqué, son plan de polarisation subit une rotation ϕ_F [8].

Ce phénomène est expliqué par le fait que les indices de réfraction n_+ et n_- pour la lumière polarisée circulairement droite et gauche dans une substance inactive, deviennent différents l'un de l'autre lorsque cette dernière est soumise à un champ magnétique.

La lumière polarisée linéairement peut-être représentée comme une superposition de deux ondes l'une polarisée circulairement droite et l'autre polarisée circulairement gauche. Par conséquent lorsqu'une lumière polarisée linéairement traverse un matériau aimanté ou soumis à un champ magnétique de sorte que $n_+ \approx n_-$, les deux ondes polarisées circulairement (droite, gauche) vont se propager avec deux vitesses différentes $\frac{c}{n_+}$ et $\frac{c}{n_-}$.

Alors le plan de polarisation va subir une rotation d'un angle donné par l'expression

$$\theta_F = \frac{\omega}{2c} (n_+ - n_-) \cdot L \quad (III.28)$$

Où L et C sont respectivement la fréquence et la vitesse de la lumière. L : est le chemin optique du faisceau lumineux dans le milieu considéré. La rotation Faraday θ_F et l'ellipticité η_F sont définies en utilisant les mêmes conventions adoptées pour l'effet Kerr polaire.

Pour les petits angles, l'expression de l'effet Faraday est donnée par

$$\phi_F = \theta_F + i\eta_F \approx \frac{i\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \frac{\omega L}{2c} = \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{xx}}} \left(\frac{2\pi L}{c} \right) \quad (III.29)$$

Dans la géométrie longitudinale, l'effet Faraday est donné par l'expression [7]

$$\phi_F = \theta_F + i\eta_F \approx \frac{i\varepsilon_{xy}}{\sqrt{\varepsilon_{xx}}} \frac{\omega L}{2c} \tan \varphi_l \quad (III.30)$$

Ou φ_l est l'angle de réfraction.

L'effet Faraday est utilisé pour l'étude des propriétés magnéto optiques des semi-conducteurs transparents.

Bibliographie

- [1] Hamza Otmani, « *Etude théorique des propriétés photoniques à structure ferrite grenat de bismuth(BIG)* », thèse de doctorat, université Constantine I, (2014).
- [2] Guendouze Atika, « *étude des propriétés structurale et magnétique des couches ferromagnétiques par microscopie à champ proche et effet Kerr magnéto-optique* », mémoire de magister, université d'Oran, (2011).
- [3] F. ROYER « *Etude et application des effets magnéto-optiques dans des couches minces sol-gel dopées a` l'aide de nanoparticules magnétiques*», Thèse de Doctorat de L'INPG, France,(2004).
- [4] Abdesselam Hocini, «*étude des guides d'ondes magnéto-optiques sol-gel en couches minces pour l'application en optique intégrée* », Thèse de doctorat, Université Mentouri de Constantine, (2008).
- [5] M.Dressel and G.Greiner, *Electrodynamics of solids*, Cambridge University Press, Cambridge, (2001).
- [6] W.H.Kleiner, *Phys.Rev.* **142** (1966) 318
- [7] W.Reim and J.Schoenes,in *Ferromagnetic Materials* ,edited by E.P Wohlfarth and K.H.J.Buschow (North-Holland, Amesterdam, **vol.4**, (1988), 588.
- [8] M.Faraday ,*Phil.Trans.R.Soc.***136**,1 (1846).

Chapitre IV

Résultat et discussion

IV-1 Introduction

Dans ce travail, nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques magnétiques ; et magnéto-optiques du métal FeNi dans les deux structure CFC et L_{10} .

Pour étudié se composé en utilisant les calculs des premiers principes avec la méthode des FP-LAPW dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approximation du gradient généralisé GGA, PBEsol [1] implémentés dans The Exciting Code [2].

IV-2 Détail de calcul

IV-2-1 Teste de convergence

Pour une bonne convergence nous avant calculé l'énergie totale de l'élément FeNi par rapport au choix de l'échantillonnage de points k pour l'intégration dans la zone de Brillouin [3] paramètre ngridk (kpoint) et à la dimension de l'ensemble de base (paramètre gkmax)

Les figures (**Figure IV.1. a**) et **(b)**) montrent qu'une maille de $12 \times 12 \times 12$ assure une bonne convergence. Pour les dimensions de l'ensemble de base on trouve que rgkmax converge a 9 pour FCC et 8 pour L_{10} .

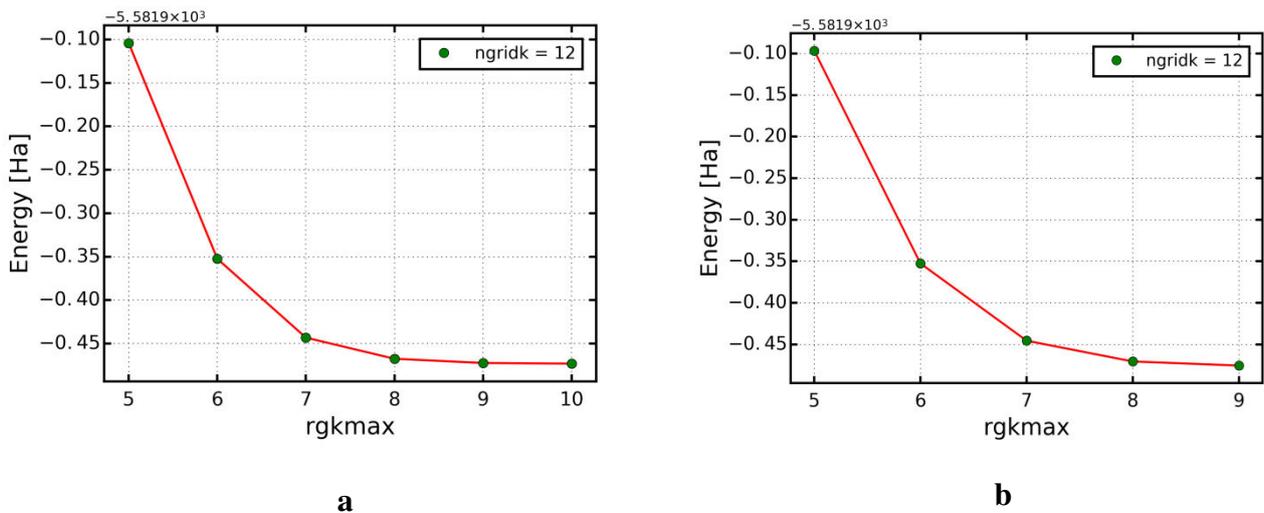


Figure IV.1 : la convergence de l'énergie totale en fonction de nombre de points K et $rgkmax$ pour :a) CFC ;b) L_{10} .

IV.3 Propriétés structurales

Le composé binaires FeNi a deux phase ; une dans la structure cubique de groupe d'espace : $Fm-3m(n = ^\circ 221)$ CFC, l'autre tétragonal L_{10} de groupe d'espace : $P4/mmm (n = ^\circ 123)$, et dont les positions atomiques du Fe $(0, 0, 0)$; $(1/2, 1/2, 0)$ l'atome du Ni se situe $(1/2, 0, 1/2)$; $(0, 1/2, 1/2)$ (Figure. IV-2)

Afin d'évaluer les paramètres de maille, nous avons effectué un calcul auto-cohérent de l'énergie totale pour plusieurs valeurs du paramètre de réseau au voisinage de la valeur expérimentale, les courbes d'énergie totale en fonction du volume sont illustrés dans les figure IV.3 (a et b)

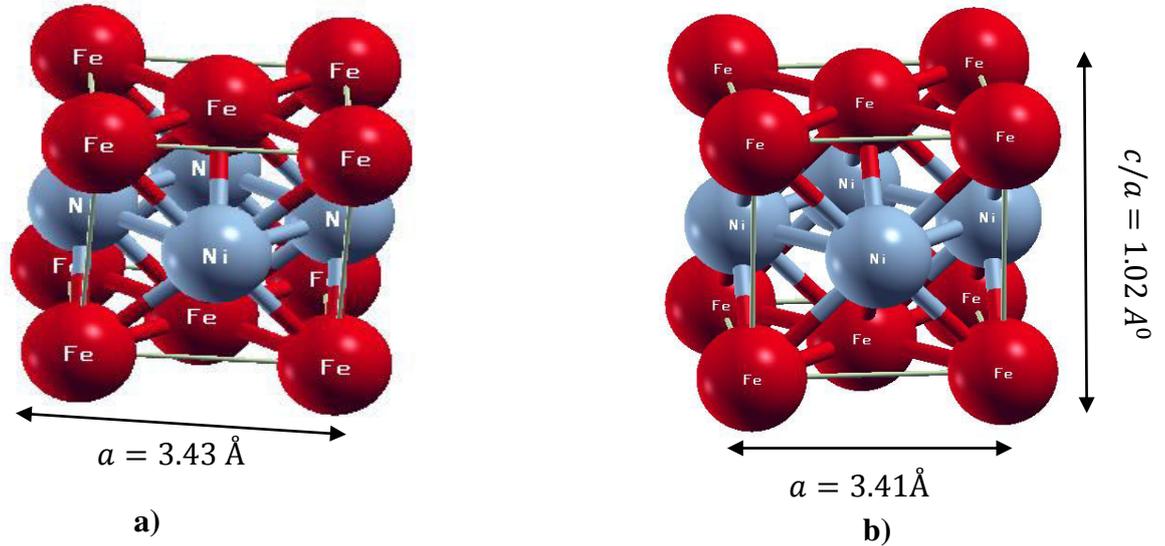


Figure IV.2 : a) structure *FeNi-CFC* ;b) structure *FeNi-L₁₀*.

L'optimisation cellulaire variable des deux structures sont relaxé avec une force totale de $1 \times 10^{-5} \text{ Ry / a.u.}$, ce qui est assez suffisant pour une configuration d'énergie minimale.

L'énergie totale calculée pour L₁₀a été ajustée à équation d'état de Birch–Murnaghan [4], afin d'estimer le module de masse isotherme (Tableau IV.1).

Pour notre calcul, nous avons trouvé que les paramètres du réseau ; L₁₀FeNi ($a = 3,412 \text{ \AA}$ et $c / a = 1,02$) et ; CFC ($a = 3.43 \text{ \AA}$) qui sont rapproché aux résultats expérimentaux [5, 6,7,9].

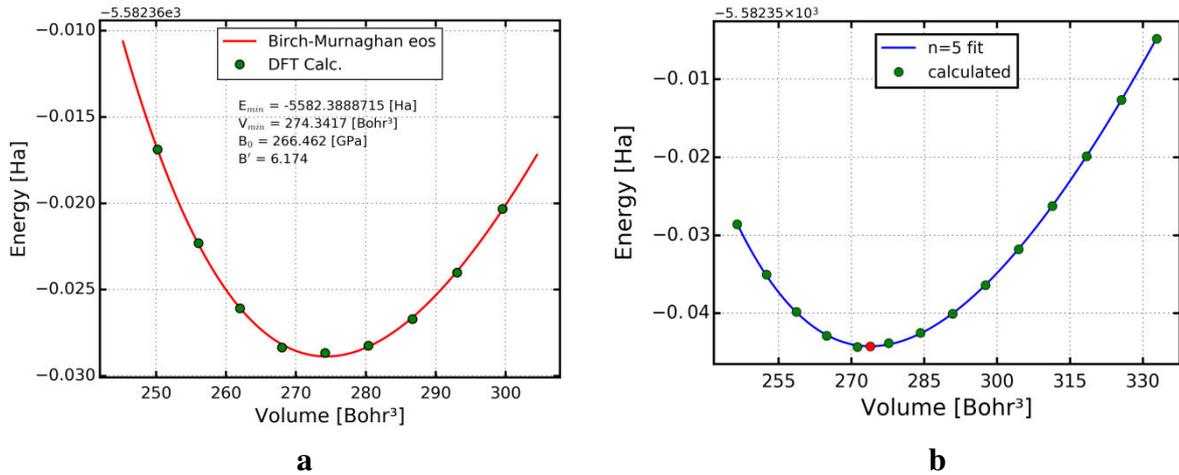


Figure IV.3 : la variation de l'énergie en fonction du volume ; a) pour L_{10} , b) CFC.

Tableau IV.1 : Données structurales pour l'élément FeNi ; L_{10} et CFC

Paramètre	FeNi (cfc)	FeNi(L_{10})
$a(\text{Å})$	3.4336 3.58 ^a ;3.55 ^[d]	3.4128 3.56 ^c ;3.58 ^[b]
c/a	-----	1.028 ;1.006 ^c
$V(\text{Å})^3$	40.58	40.65 ; 45.37 ^[c]
$B_0(\text{GPa})$	268.395	266.462

^aRéf.[5]

^bRéf.[6]

^cRéf.[7]

^dRéf[8]

IV-4 Propriétés électroniques et magnétiques

Pour analyser les propriétés électroniques, nous avons calculé la structure de la bande électronique le long de la symétrie élevée (Figure IV.4).

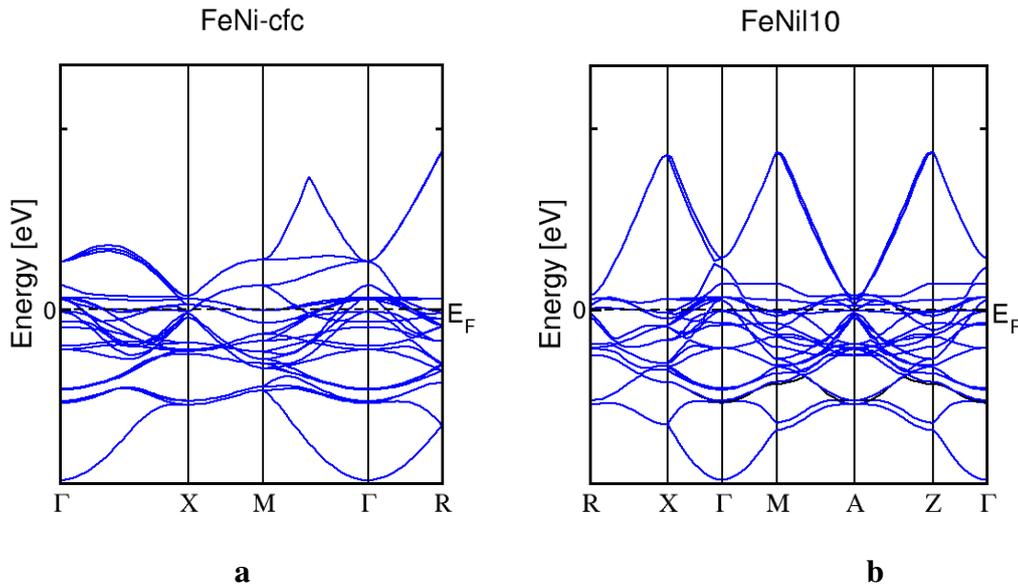


Figure IV.4 : Structure de bandes du FeNi ; a) CFC ; b) L10

L'ensemble de la zone de Brillouin ainsi que la densité d'état totale (DOS), et partielles (PDOS), projetée en utilisant les calculs optimisés des paramètres de cellule illustrés aux figures IV.5 et figure IV.6, des structures CFC et L₁₀ respectivement.

Sur les figures IV.4 (a) et (b), la position de E_f dans la structure de bande électronique indique la nature métallique des deux structure L₁₀ et CFC, sans déficit énergétique au niveau de Fermi.

La densité électronique totale des états reflète toutes les caractéristiques générales de structure de bande électronique.

D'après les figures (IV.5 et IV.6), on peut dire que la densité d'états du FeNi est regroupée principalement dans deux régions: (i) les pics significatifs situés juste en dessous du E_f dans la région de la bande de valence sont principalement dominés par les états 3d-Ni et 3d-Fe, (ii) le nombre de pics dans la région supérieure à E_f dans la bande de conduction est principalement dû à l'effet combiné de 4s-Fe et les états 4s-Ni.

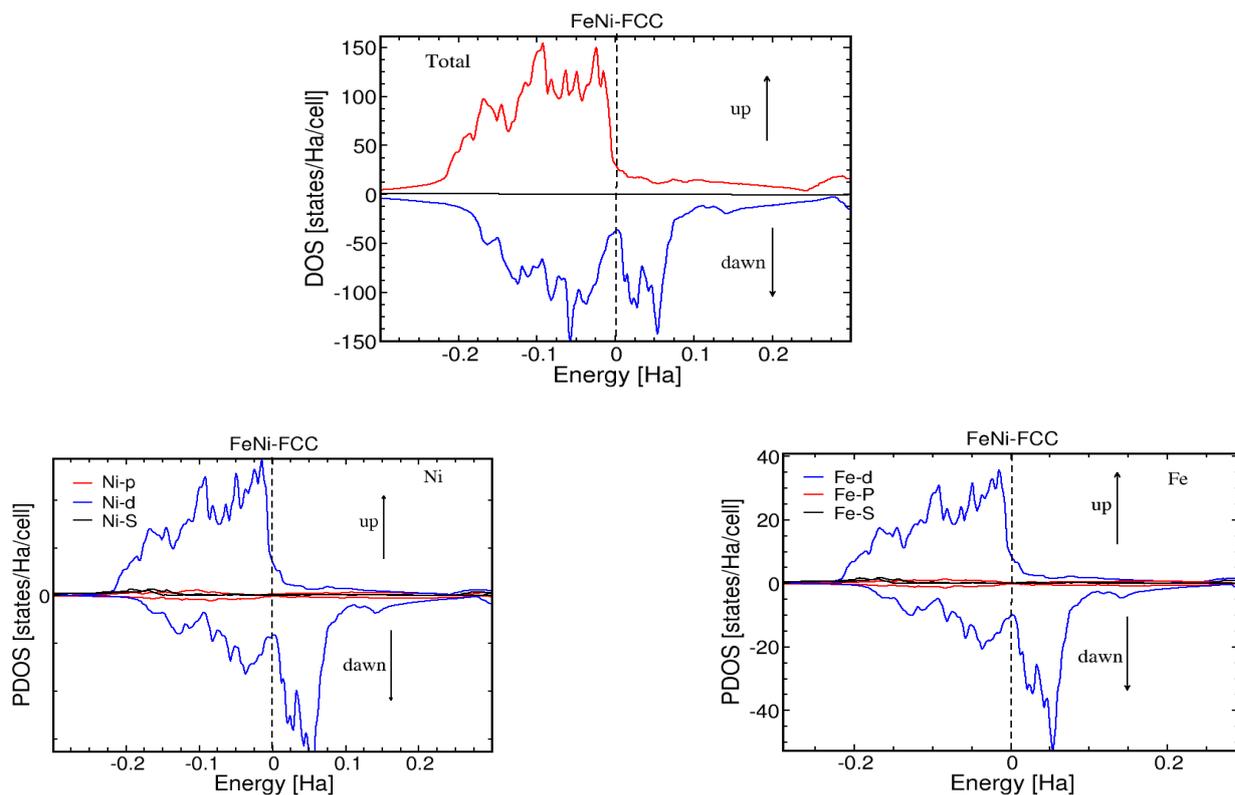


Figure IV.5 : Densité d'état total (DOS) et partiel (PDOS) du FCC

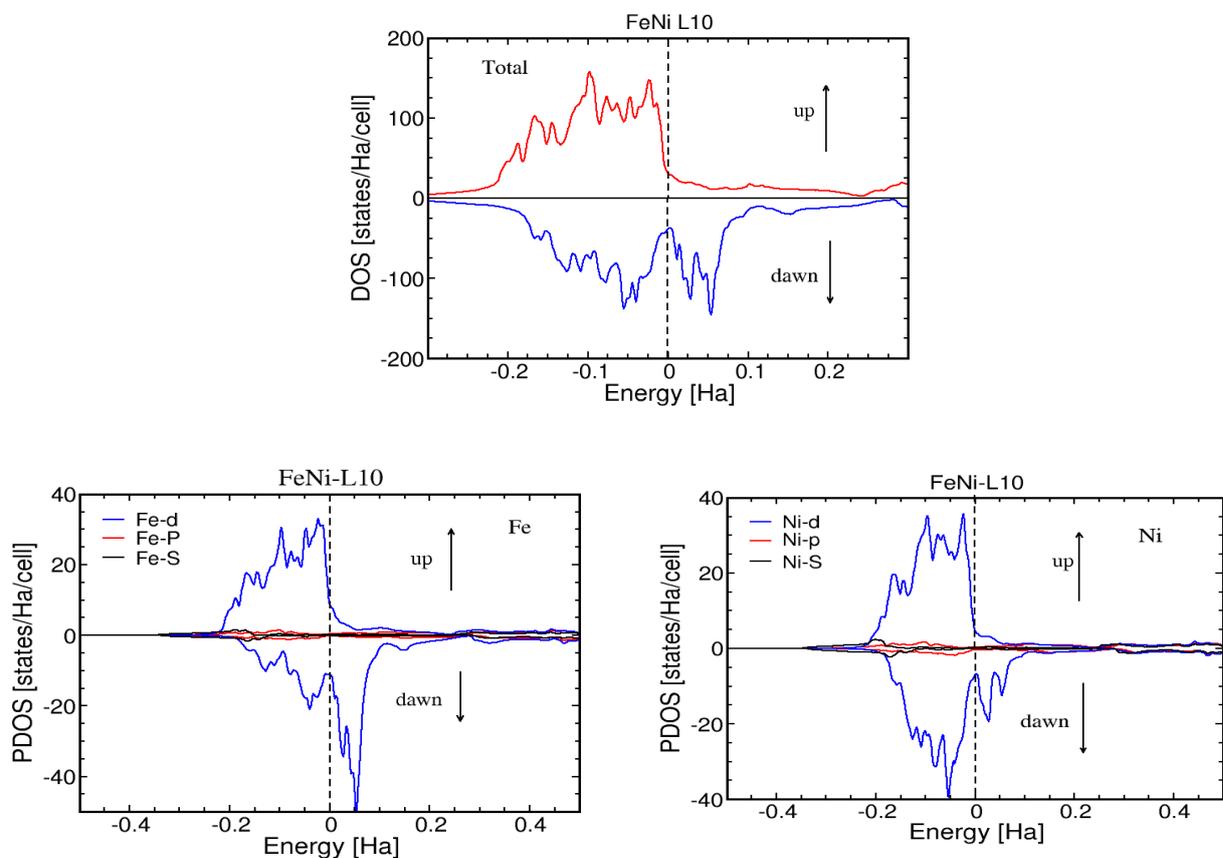


Figure IV.6 : Densité d'état total (DOS) et partiel (PDOS) du L10.

Il ressort également de la figure (IV.5, IV.6) que les électrons de valence à orbite tridimensionnelle sont plus peuplés à des points de symétrie élevés responsables de nature métallique.

Les valeurs des moments magnétiques total et partiel des deux structures CFC et L₁₀ sont résumés dans le tableau IV.2.

Dans ces conditions, la structure ferromagnétique est supposée, telle que la direction d'aimantation est parallèle à l'axe Z

on remarque que les états d décident le moment magnétique local de Ni et Fe pour les deux structures

Tableau IV.2 : valeurs du moment magnétique total et partiel.

Moment	FeNi cfc	FeNi L ₁₀	expérimental
Fe	2.285 μ_B	2.2803 μ_B	2.60 ^[b] 2.22 ^a μ_B
Ni	0.638 μ_B	0.629 μ_B	0.67 ^b 0.61 ^a μ_B
Total	2.93 μ_B /at.	2.91 μ_B /at.	2.8 ^a μ_B /at.

^a Réf. [9]^{théor}

^b Réf. [10]

Les valeurs obtenues pour les moments magnétiques, pour L₁₀ sont en bon accord avec les résultats théoriques[9].

IV-5 Propriétés magnéto- optiques

Pour l'étude des propriétés magnéto-optique on a introduit l'interaction spin-orbite. Les calculs de P-MOKE pour l'élément FeNi dans les deux structures qui sont représentés dans les spectres de la figure IV.4 et IV.5. La gamme d'énergie est élargie jusqu'à 9 eV.

Pour la structure L₁₀, le spectre de la rotation Kerr possède un pic négatifs de $\theta_k = (-0.3^0 \text{ et } -0.23^0)$ dans le domaine du visible, à E= (6.14 eV et 6.21 eV), pour les deux structures CFC et L₁₀ respectivement.

Les structures CFC et L₁₀ sont caractérisées également par deux pics positifs d'ellipticités de Kerr $\gamma_k = (0.24^0, 0.17^0)$, dans le domaine visible à E = (4.9 eV, 5.57eV)

Pour expliquer l'origine microscopique des différents pics présents dans les spectres de l'effet Kerr polaire, une analyse combinée des spectres des densités d'états, et de la structure de bandes est exigé.

A cause de la nature métallique des systèmes, le gap d'énergie disparaît. Comme les bandes d'énergie sont très serrées, il est difficile de distinguer les bandes Individuelles correspondant aux états partiels les figures IV.4. Nous nous sommes donc satisfaits d'une explication qualitative des transitions interbandes et nous avons tenu compte uniquement des transitions entre états localisés.

Tableau IV.3 : les transitions interbandes pour l'élément FeNi .

FeNi	θ_k	γ_k
CFC	-0.3^0 (6.14eV) Fe ($S\uparrow-d\downarrow$)	0.24^0 (4.9eV) Ni ($d\uparrow-d\downarrow$)
L ₁₀	-0.23^0 (6.21eV) Fe ($S\downarrow-d\downarrow$)	0.17^0 (5.5eV) Ni ($P\uparrow-d\downarrow$)

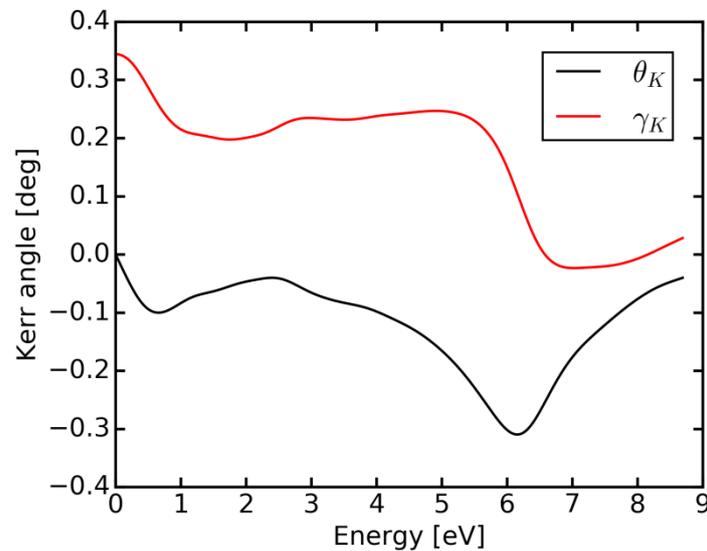


Figure IV.7: Spectre de Kerr de FeNi CFC $\theta_k = (6.14 \text{ eV}, -0.30^0)$, $\gamma_k = (4.9 \text{ eV}, 0.24^0)$

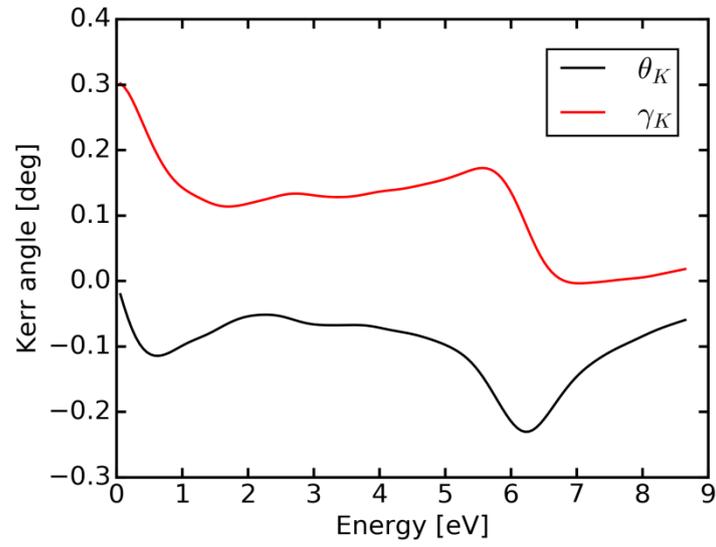


Figure IV.8 : Spectre de Kerr de FeNi L_{10} ; $\theta_k = (6.21\text{eV}, -0.23^\circ)$ et $\gamma_k = (5.57\text{eV}, 0.17^\circ)$

Bibliographie

- [1] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. L. Monson, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 186406 (2008).
- [2] A. Gulans, S. Kontur, C. Meisenbichler, D. Nabok, P. Pavone, S. Rigamonti, S. Sagmeister, U. Werner, and C. Draxl, *exciting — a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory*, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 363202 (2014).
- [3] H. J. Monkhorst and J. D. Pack. Special points for Brillouin zone integrations. *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5183.
- [4] Birch, Francis. "Finite Elastic Strain of Cubic Crystals". *Physical Review*. **71** (11): (1947) 809–824.
- [5] M. abd rahim guittoum , etude des propriétés structurales , microstructurales, et magnétiques des nanoparticules FeNi , thèse de doctorat université Ferhat Abbas-setif, (2008).
- [6] Sh Goto, H. Kura , scientific reports. 13216. (2017).
- [7] E. d. Strom A. CHICO J. JAKOBSSON A. Bergman and Rusy, *physique review B* **90**, 2014, 014402, (preprint AUXIV/140.7097V1).
- [8] JCPDS -CARD N 23-0297
- [9] H. W. White , B. J. Beaudry , P. Burgard, S. Legler, and B. N. Harmon, *AIP Conf. Scientific Reports*. 13216. (2017).
- [10] C. G. Shull and M. K. Wilkinson, *Phys. Rev.* **97**, 304 (1955)

Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales, magnétiques et magnéto-optiques dans les deux structures FCC et L_{10} du système FeNi, susceptible d'être utilisé dans les applications technologiques notamment dans le domaine de stockage et d'enregistrement magnétique.

La structure de bande a été calculée par la méthode FP-LAPW implémenté dans EXSITING dans le cadre de l'approximation GGA-PBE sol, les calculs sont auto-cohérents.

Les propriétés structurales sont déterminées à partir de la relaxation des systèmes étudiés par un processus d'optimisation de l'énergie totale avec une précision de 10^{-5} Ry

La structure cristalline trouvée atteint l'équilibre $a=3.43\text{\AA}$ pour FCC et $c/a=1.02$ pour L_{10} qui sont rapproché aux résultats expérimentaux.

Les propriétés magnétiques sont étudiées à travers le calcul des moments magnétiques via le calcul de la structure électronique sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, prouvant que le système FeNi est métallique.

La phase magnétique des deux structures étudiées est caractérisée par un couplage ferromagnétique.

Nous nous sommes intéressés particulièrement à l'étude de l'effet Ker magnéto-optique dans sa géométrie polaire par le calcul des spectres des rotations et d'ellipticités de Kerr en fonction des énergies des photons incidents. Nous avons trouvé un angle de Kerr de $(-0.3^\circ, -0.24^\circ)$ pour les structures FCC et L_{10} respectivement dans le domaine visible ; α (6.3 eV) pour les deux structures. Ainsi que pour ellipticité qui est de $(0.24^\circ, 0.17^\circ)$ respectivement.