

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA-BOUMERDES



Faculté Technologie

Thèse de Doctorat

Présentée par :

Kadri Salim

En vue de l'obtention du diplôme de **DOCTORAT Science** en :

Filière : Génie Mécanique

Spécialité : Construction Mécanique

**Etude Théorique des Propriétés Structurales, Mécaniques
et Thermiques des Alliages Heusler**

Devant le jury composé de :

M ^r Aguib	Salah	Pr	UMB Boumerdès	Président
M ^r Tourab	Mohamed	MCA	UMB Boumerdès	Directeur
M ^r Chellil	Ahmed	Pr	UMB Boumerdès	Examineur
M ^r Raouache	Elhadj	MCA	U Bordj Bou Arreridj	Examineur
M ^r Bouchelaghem	Abdelaziz Mahmoud	Pr	UBM Annaba	Examineur
M ^r Benderradji	Razik	MCA	UMB M'sila	Examineur

Année Universitaire 2023/2024

Dédicaces

A la mémoire de mon Père

A ma mère, sans elle, je ne serais jamais ce que je suis aujourd'hui

A mon frère : Zoheir

A mes soeurs : Zahia et Salima

A ma femme

A mes anges Mouhamed Yanis , Ahmed Yacine et Yasmine

A Rabie, Malek, Redha, Walid

A mes très chères collègues les Professeurs : Bouaricha Amor, Laabassi

Abdallah, Boudechiche Salim, Berkani Mahièddine, Hassani Mouhammed,

Rahmaoui Fath eddine Zakaria.

Je dédie ce travail.

Remerciements

*Je tiens tout d'abord à exprimer ma gratitude envers **Dieu**, qui nous a accordé la force, la volonté et la santé nécessaires pour mener à bien ce travail tout au long de ces années.*

*Je tiens à remercier le Docteur **Tourab Mohamed** de m'avoir encadré et me donné cette chance avec toute confiance pour pouvoir achevé ce travail dans les délais.*

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements au Docteur **Amraoui Rabie** pour sa contribution précieuse à ma formation. Ses conseils avisés et ses commentaires pertinents ont grandement enrichi mon parcours académique.*

*Je tiens à remercier mon Professeur, père et ami **Bouaricha Amor**, et mon étudiant de Master **Belkhiri Akram**.*

*Je remercie Professeur, **Nour Abdelkader**, Directeur de Laboratoire de Recherche Dynamique des moteurs et Vibroacoustique.*

*Je souhaite exprimer ma sincère gratitude au Professeur **Aguib Salah** pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail et l'honneur qu'il m'a accordé en acceptant de présider le jury.*

*Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers M^r. **Bouchelaghem Abdelaziz Mahmoud**, professeur à l'Université Badji Mokhtar Annaba, M^r.**Chellil Ahmed**, professeur à l'Université de M'hamed Bougara de Boumerdès, et M^r.**Raouache Elhadj**, professeur à l'Université de Mohamed El Bachir El Ibrahimi, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de faire partie de mon jury. Leur expertise et leurs précieux commentaires ont grandement contribué à l'évaluation et à l'amélioration de mon travail.*

*Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à tous les membres du laboratoire LMI de l'Université Badji Mokhtar Annaba, ainsi qu'aux membres du laboratoire LPR de l'Université Badji Mokhtar Annaba, pour leur soutien et leur précieuse assistance. Je souhaite tout particulièrement remercier le Professeur **Meradji Hocine** et le Docteur **Boumaza Akila** pour leur contribution remarquable. Leur expertise et leur soutien ont été d'une importance capitale pour la réussite de ce travail.*

Je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance envers ma mère, mes frères et toute ma famille pour leur soutien inconditionnel tout au long de mes études.

Abstract

The compounds of the Half-Heusler family are well known in the world of materials physics and semiconductors. This family of materials exhibits mechanical, thermal, and thermoelectric properties that are adaptable to electrical and microelectronic domains. Nowadays, this family of compounds remains a prime focus due to their properties, which are either achieved through concrete synthesis or ab-initio simulations.

The approach undertaken in this work involves selecting a new compound, similar to polysilicon, analyzing it through numerical simulation, and predicting the performance of the electrothermal actuator of this new material before its synthesis.

To this end, we have chosen Half-Heusler compounds on which we conducted an ab-initio study using Density Functional Theory (DFT) to determine their elastic properties. For solving this theory (DFT), the FP-LAPW (Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave) method under the Wien2k code was applied, utilizing the GGA-WC (Generalized Gradient Approximation) approach. Leveraging the power of the Gibbs and BoltzTraP computational codes, solving the quasi-harmonic Debye and Boltzmann equations enabled us to determine certain thermal and transport properties. Subsequently, utilizing these properties in a multiphysics simulation model under Ansys allowed us to predict and observe the state of the actuator with the physical properties of the new compound.

Keywords: DFT, ab-initio, Structural Properties, Mechanical Properties, Thermal Properties, Transport Properties, Heusler and Half-Heusler Alloys, electrothermal actuator.

Les composés de la famille des demi-Heusler (Half-Heusler) sont très connus dans le monde de la physique des matériaux et des semi-conducteurs. Cette famille de matériaux a des propriétés mécaniques, thermiques et thermoélectriques adaptables aux domaines électriques et microélectroniques. De nos jours, cette famille de composés constitue encore une cible privilégiée à travers leurs propriétés obtenues, soit par une élaboration concrète, soit par la simulation ab-initio.

La démarche entreprise dans ce travail est de choisir un nouveau composé, similaire au polysilicium, de le traiter par simulation numérique et de prédire les performances de l'actionneur électrothermique de ce nouveau matériau avant son élaboration.

A cet effet, nous avons choisi les composés demi-Heusler, sur lesquels nous avons mené une étude ab-initio en appliquant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) afin de déterminer les propriétés élastiques. Pour la résolution de cette théorie (DFT), la méthode FP-LAPW (ondes planes augmentées) sous code Wien2k a été appliquée avec utilisation de l'approximation GGA-WC (gradient généralisé). Profitant de la puissance des deux codes de calculs Gibbs et Boltztrap, la résolution des équations quasi-harmonique de Debye et de Boltzmann nous ont conduit à déterminer quelques propriétés thermiques et de transports. Par la suite, l'exploitation de ces propriétés dans un modèle de simulation multiphysique sous Ansys a permis de prédire et d'observer l'état de l'actionneur avec les propriétés physiques du nouveau composé.

Mots clés : DFT, ab-initio, Propriétés Structurales, Propriétés Mécaniques, Propriétés Thermiques, Propriétés de Transport, Alliages Heusler et demi Heusler, actionneur électrothermique.

تُعرف مركبات عائلة نصف-هيوسلر Half-Heusler على نطاق واسع في عالم فيزياء المواد وأشباه الموصلات. تتميز هذه العائلة من المواد بخصائص ميكانيكية، حرارية، وكهربائية حرارية قابلة للتكيف مع المجالات الكهربائية والميكروإلكترونية. في الوقت الحالي، لا تزال هذه العائلة من المركبات هدفًا رئيسيًا بفضل خصائصها التي تُكتسب إما من خلال التصنيع الفعلي أو عبر المحاكاة من الدرجة الأولى (ab-initio)

النهج المتبع في هذا العمل هو اختيار مركب جديد مشابه للبوليسيليكون، ومعالجته باستخدام المحاكاة الرقمية، والتنبؤ بأداء المحرك الكهروحراري لهذا المركب الجديد قبل تصنيعه.

لهذا الغرض، اخترنا مركبات نصف-هيوسلر وأجرينا عليها دراسة باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لتحديد خصائصها المرنة. لحل هذه النظرية (DFT)، تم استخدام طريقة الموجات المستوية المعززة (FP-LAPW) باستخدام كود Wien2k مع تطبيق تقريب GGA-WC (تقريب التدرج العام). من خلال الاستفادة من قوة برامج الحساب Gibbs و BoltzTraP، أدى حل معادلات ديبي شبه المتناغمة ومعادلات بولتزمان إلى تحديد بعض الخصائص الحرارية والنقلية. بعد ذلك، تم استخدام هذه الخصائص في نموذج محاكاة متعدد الفيزياء باستخدام برنامج Ansys للتنبؤ ومراقبة حالة مفاعل كهرو حراري مع الخصائص الفيزيائية للمركب الجديد.

كلمات مفتاحية: نظرية الكثافة الوظيفية، محاكاة من الدرجة الأولى، خصائص بنيوية، خصائص ميكانيكية، خصائص حرارية، خصائص كهرو حرارية، مركبات ونصف مركبات هيوسلر، مفاعل كهرو حراري.

Liste des Figures

Figure I.1 : Conception du condensateur de Tesla avec plaque interdigitale. -----	4
Figure I.2 : Un exemple de conception moderne de capteur – transducteur. -----	5
Figure I.3 : Grille résonnante d'un transistor MOS. -----	6
Figure I.4 : L'environnement d'un MEMS. -----	8
Figure I.5 : Définition de la notion de MEMS / Microsystèmes. -----	8
Figure I.6 : les composants de MEMS. -----	9
Figure I.7 : Ordre de grandeur. -----	10
Figure I.8 : Tailles des MEMS. -----	10
Figure I.9 : L'accéléromètre (Airbag) Technologie issue des C.I. -----	12
Figure I.10 : Base de conception des microsystèmes. -----	12
Figure I.11 : Représentation modulaire d'un capteur. -----	13
Figure I.12 : définition de microsysteme (MEMS). -----	14
Figure I.13 : Les domaines d'application des MEMS. -----	15
Figure I.14 : les microsystèmes dans l'automobile. -----	16
Figure I.15 : Les microsystèmes dans les satellites. -----	17
Figure I.16 : Les microsystèmes dans l'avionique. -----	17
Figure I.17 : Exemples de bio MEMS. -----	18
Figure I.18 : Distributeur d'insuline, Bio puce à ADN, Micro pompe. -----	20
Figure I.19 : Les MS dans le corps. -----	20
Figure I.20 : projection d'images vidéo : Les systèmes DMD de Texas Instrument et GLV .	21
Figure I.21 : Les MEMS-RF. -----	22
Figure I.22 : Exemple d'un réseau d'actionneurs électrothermiques. -----	23
Figure I.23 : Représentation schématique d'un actionneur. -----	24
Figure I.24 : Modes d'actionneur. -----	24
Figure I.25 : Principe d'un actionneur électrostatique de type plaques parallèles. -----	25
Figure I.26 : Principe d'un actionneur électrostatique à peigne interdigité. -----	26
Figure I.27 : Actionneur électromagnétique d'une Micro pompe. -----	27
Figure I.28 : Actionneur électromagnétique. -----	28
Figure I.29 : Principe d'un actionneur piézoélectrique de type bilame. -----	29
Figure I.30 : Schéma d'un actionnement magnétostrictif. -----	29
Figure I.31 : AMF déformé. -----	30
Figure I.32 : Mouvements et changement de phases d'un AMF. -----	30
Figure I.33 : Micro-pince neurochirurgicale. -----	31
Figure I.34 : Principe d'actionnement thermique se déformant dans le plan par une différence de matériau des deux bras. -----	32
Figure I.35 : Schémas des actionneurs thermiques absolus et différentiels. -----	33
Figure I.36 : Micro actionneur thermique à poutres courbées entraînées électriquement (sous le microscope). -----	33
Figure I.37 : Micro-actionneur thermomécanique. -----	34
Figure I.38 : Différents actionnements thermiques dans le plan. -----	35
Figure I.39 : Principe d'un actionneur thermique bilame. -----	35
Figure I.40 : Actionneur électrothermique avec un déplacement hors plan d'un micro-relais. -----	36
Figure I.41 : Tige du silicium. -----	37
Figure II.1 : La structure Semi-Heusler C1 _b . -----	45
Figure II.2 : La structure Full-Heusler L21. -----	47

Liste des Figures

Figure II.3 : Les structures (régulière et inverse) des alliages Heusler à base de Mn2 dépendant de la position de l'élément Y. -----	47
Figure II.4 : Composé Heusler X ₂ YZ, (a) Structure L21, (b) Structure D022. -----	48
Figure II.5 : Effet Seebeck. -----	49
Figure II.6 : Effet Peltier, selon le sens du courant I -----	50
Figure II.7 : Effet Thomson ; T _f -température froide ; T _c -température chaude. -----	51
Figure III.1 : La DFT représentée sous forme d'un diagramme. -----	70
Figure III.2 : Potentiel Muffin-Tin «MT ».-----	73
Figure III.3 : Le code Wien2k sous forme d'organigramme. -----	81
Figure IV.1 : Choix des composés demi-Heusler X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. -----	85
Figure IV.2 : Structure de composés demi-Heusler CoMnAs. -----	86
Figure IV.3 : L'énergie totale des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs pour tous les types de structures.-----	88
Figure IV.4 : Illustration 3D du module de compressibilité et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. -----	93
Figure IV.5 : Surface 3D du module de cisaillement et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. -----	93
Figure IV.6 : Surface 3D du module de Young et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. -----	94
Figure IV.7 : Coefficient de dilatation thermique en fonction de la température à différentes pressions pour les composés XMnAs (X=Co, Rh et Ir). -----	97
Figure IV.8 : Capacité calorifique C _p en fonction de la température à différentes pressions pour les composés XMnAs (X=Co, Rh et Ir). -----	99
Figure IV.9 : Capacité calorifique C _v en fonction de la température à différentes pressions pour les composés XMnAs (X=Co, Rh et Ir). -----	99
Figure IV.10 : Le coefficient de Seebeck S en fonction du μ . -----	102
Figure IV.11 : Conductivité électrique σ/τ en fonction du μ . -----	103
Figure IV.12 : Conductivité thermique électronique κ/τ en fonction du μ .-----	103
Figure IV.13 : Facteur de puissance (PF) en fonction du μ .-----	104
Figure IV.14 : Facteur de mérite (ZT) en fonction du μ .-----	106
Figure IV.15 : Choix du composé demi-Heusler FeAsNb. -----	107
Figure IV.16 : Le micro actionneur électrothermique. -----	109
Figure IV.17 : Conditions aux limites électriques.-----	110
Figure IV.18 : Conditions aux limites de transfert de chaleur.-----	111
Figure IV.19 : Conditions et contraintes structurelles aux limites. -----	111
Figure IV.20 : Résultat de maillage. -----	112
Figure IV.21 : Déplacement de l'actionneur électrothermique pour les deux matériaux polysilicon et FeAsNb. -----	113
Figure IV.22 : Evolution de la température du substrat pour les deux matériaux polysilicon et FeAsNb. -----	114
Figure IV.23 : Courbe de déplacement maximum pour les deux matériaux (PolySilicon et FeAsNb). -----	115

Liste des Tableaux

Tableau I-1 : Propriétés Physiques du Polysilicium.	39
Tableau II-1 : Principales combinaisons des alliages Heusler	43
Tableau II-2 : Principales combinaisons des alliages Half Heusler (Semi-Heusler).	44
Tableau II-3 : Occupation des sites non équivalents dans la structure semi-Heusler $C1_b$	45
Tableau IV-1 : Propriétés d'état fondamental des semi- Heuslers X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.	88
Tableau IV-2: Constantes élastiques calculées des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. ...	89
Tableau IV-3 : anisotropie A, coefficients de Cauchy CP et masse volumique ρ en.Kg /m ³ obtenus.	91
Tableau IV-4 : Module de compression (B) GPa, Module de cisaillement (G) GPa, Module de Young (E) GPa, Coefficient de poisson (ν), le rapport B/G, la Micro la Micro dureté (H),	95
Tableau IV-5 : Module de compression (B) GPa, Module de cisaillement (G) GPa, Module de Young (E) GPa, Coefficient de poisson (ν), le rapport B/G, la Micro dureté (H), Température de Debye (θ_D) en K, Température de Fusion (T_m) en °K.	107
Tableau IV-6 : Module d'Young en GPa, Coefficient de Poisson, Coefficient de dilatation thermique en °K ⁻¹ , Résistivité électrique en Ωm , Conductivité thermique en W.m ⁻¹ °K ⁻¹	108

Introduction générale	1
Chapitre I : Principes fondamentaux des microsystèmes électromécaniques et les actionneurs	4
I.1 Introduction	4
I.2 Etat de l'art et historique	4
I.3 Interprétation	6
I.4 Exploration des avantages et dimensions des microsystèmes	9
I.5 Réduction et miniaturisation des Microsystèmes	11
I.6 Procédé et composants clés de MEMS	12
I.7 Les diverses familles des MEMS	14
I.8 Secteurs d'attentions des microsystèmes	15
I.8.1 L'industrie véhicule :	15
I.8.2 Le secteur spatial	16
I.8.3 Le secteur aérien	17
I.8.4 Le secteur biomédical	18
I.9 Les micros actionneurs	22
I.10 Les Différents types d'actionnements	24
I.10.1 Actionnement électrostatique	25
I.10.2 Actionneur électromagnétique	26
I.10.3 Actionnement piézoélectrique	28
I.10.4 Actionneur magnétostrictif	29
I.10.5 Actionneur à mémoire de forme	30
I.10.6 Actionnement électrothermique	31
I.11 Fiabilité d'un micro actionneur	36
I.12 Matériaux pour la fabrication des MEMS	37
I.12.1 Le Silicium (Polysilicium)	37
I.12.2 Polymères	37
I.12.3 Céramiques	37
I.12.4 Métal	38
I.13 Considérations sur les Avantages et les inconvénients des microsystèmes	38
I.14 L'intérêt du Silicium	38
I.15 Problématique	40
I.16 Bibliographies	41

Chapitre II : Les alliages Heuslers.....	43
II.1 Introduction	43
II.2 Classification des alliages Heusler.....	44
II.2.1 Alliages Semi-Heusler (Half-Heuslers).....	44
II.2.2 Les alliages Heusler (Full-Heuslers)	45
II.3 Structure cristalline des alliages Heuslers.....	45
II.4 Effets thermoélectriques	48
II.4.1 L'effet Seebeck.....	48
II.4.2 L'effet Peltier	49
II.4.3 L'effet Thomson	50
II.4.4 L'effet Joule	51
II.5 Les variables thermoélectriques.....	51
II.5.1 Potentiel chimique	51
II.6 Coefficients thermoélectriques	52
II.6.1 Conductivité électrique	52
II.6.2 Conductivité thermique	52
II.6.3 Le facteur de mérite	54
II.6.4 Le facteur de puissance.....	54
II.7 Bibliographies	56
Chapitre III : Les méthodes numériques	58
III.1 Introduction	58
III.2 Equation de Schrödinger	59
III.3 Approximation de Born-Oppenheimer	60
III.4 Approximation de Hartree-Fock.....	61
III.5 Approximation de Thomas-Fermi	62
III.6 Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)	63
III.6.1 Théorèmes de Hohenberg et Kohn	64
III.6.2 Les équations de Kohn-Sham.....	65
III.6.3 La fonctionnelle d'échange-corrélation.....	66
III.6.4 L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	68
III.6.5 Résolution des équations de Kohn-Sham	69
III.7 Méthode des ondes planes augmentées et linéarisées FP-LAPW	71
III.7.1 Introduction	71
III.7.2 Méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (FP-LAPW)	71
III.7.3 Les rôles des énergies de linéarisation E_l	75

III.7.4 Développement de la LAPW en orbitales locales	75
III.7.5 Concept de la méthode FP-LAPW	77
III.7.6 LE CODE WIEN2K.....	78
III.8 Bibliographies	82
Chapitre IV : Résultats et discussions	85
IV.1 Introduction	85
IV.2 Première tentative pour la sélection du matériau idéal et détails de calculs.....	85
IV.2.1 Propriétés structurales.....	87
IV.2.2 Propriétés mécaniques	88
IV.2.3 Propriétés thermiques.....	95
IV.2.4 Propriétés de Transports	99
IV.3 Deuxième tentative pour la sélection du matériau idéal	107
IV.4 Modélisation de l'actionneur électrothermique	108
IV.4.1 Géométrie de l'actionneur	109
IV.4.2 Les conditions aux limites.....	110
IV.4.3 Le maillage	111
IV.4.4 Résultats de la modélisation	112
IV.5 Bibliographies	116
Conclusion générale	118

Introduction générale

Les microsystèmes, dont l'idée a été développée à la fin des années 80, sont des composants conçus pour être utilisés dans divers grands secteurs d'application tels que les transports, la santé, les télécommunications et l'environnement. Depuis leur création, ces microsystèmes ont constamment évolué en incorporant de nouvelles technologies, telles que la mécanique (MEMS), l'optique (MOEMS) et la fluidique (BioMEMS). Un objectif constant de la recherche est non seulement d'imaginer de nouvelles applications, mais aussi de développer des technologies compatibles avec une intégration multifonctionnelle sur le silicium.

Les MEMS (Microsystèmes Électromécaniques) sont des systèmes miniaturisés qui combinent des éléments mécaniques, optiques, électromagnétiques, thermiques et fluidiques avec de l'électronique sur des substrats semi-conducteurs. Ils peuvent remplir des fonctions de capteurs, mesurant des paramètres physiques tels que la pression, l'accélération, les gaz, etc., ainsi que des fonctions d'actionneurs, agissant sur l'environnement. Le terme "intelligent" est utilisé pour indiquer qu'ils disposent d'une capacité de calcul embarquée. Les MEMS peuvent fournir des fonctionnalités électromécaniques, telles que des moteurs et des relais, ainsi que des fonctionnalités optiques, comme des commutateurs optiques ou des micro-miroirs. Dans certains cas, ils peuvent être intégrés sur une puce de silicium (System on Chip) ou résulter d'un assemblage hybride (System in Package).

Ces dispositifs discrets sont présents parmi nous, mais peu de gens en sont conscients. Ils sont omniprésents dans notre quotidien et ont profondément transformé notre mode de vie, voire notre perception du monde. Leur petite taille les rend souvent invisibles. Ils opèrent dans le silence, accomplissant des tâches extrêmement complexes sans nécessiter une grande quantité d'énergie.

Les MEMS intègrent fréquemment des micro-actionneurs afin de mettre en mouvement des composants mobiles. Il existe diverses méthodes pour réaliser cette action. L'une d'entre elles est l'actionnement électrothermique, qui continue de s'améliorer de manière significative grâce aux avancées constantes dans les procédés technologiques utilisés. Son principe de fonctionnement est basé en général comme :

- En appliquant une tension, une différence de section entre les deux bras génère une disparité de densité de courant, provoquant ainsi un échauffement accru dans le bras le plus étroit,
- Cette augmentation de température entraîne une expansion du matériau, ce qui crée une longueur différente entre les deux bras. En conséquence, cette disparité de température provoque une déformation de la structure, se manifestant par une flexion.

Les avancées en micromécanique reposent sur l'utilisation de matériaux provenant de la microélectronique, tels que le silicium et le polysilicium, qui présentent des propriétés mécaniques intéressantes pour les applications ciblées. En effet, ces matériaux possèdent des modules de Young extrêmement élevés et opèrent généralement dans le domaine élastique plutôt que plastique. Cependant, en raison des problèmes actuels liés à la crise de l'approvisionnement en pièces microélectroniques, due à la monopolisation et à la demande croissante de ces matériaux, la recherche scientifique se concentre désormais sur la recherche d'alternatives, constituant ainsi l'objectif principal des chercheurs.

Les avancées des méthodes de simulation physique ont révolutionné l'investigation scientifique et la recherche de nouveaux matériaux prometteurs dans divers domaines. Les méthodes *ab-initio* sont désormais des outils essentiels pour le calcul des propriétés de systèmes complexes, remplaçant ainsi des expériences coûteuses ou dangereuses. Ces nouvelles méthodes de calcul reposent sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qui a connu un succès considérable dans la prédiction des propriétés structurales, magnétiques, électroniques, thermoélectriques, thermodynamiques et optiques.

Dans la suite de ce document, après l'introduction générale, le tapuscrit sera organisé de la manière suivante :

Chapitre I : Généralités sur les microsystemes

Le chapitre I fournira des informations générales sur les microsystemes. Nous présenterons les définitions des microsystemes, ainsi que leurs domaines d'utilisation. Nous discuterons également des diverses méthodes d'actionnement utilisés dans les microsystemes. De plus, nous aborderons la description de certains matériaux couramment usés pour la fabrication des microsystemes.

Dans le chapitre II, nous avons exposé des informations générales sur les alliages Heusler et demi-Heusler, notamment en ce qui concerne leurs propriétés et leurs structures cristallines associées.

Le chapitre III se concentrera sur les méthodes de calcul exploitées dans l'étude. Nous aborderons en détail les différentes approximations utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger, ainsi que les méthodes basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). De plus, nous fournirons une introduction au code Wien2k, qui est utilisé dans nos calculs.

Dans le chapitre IV, nous présenterons l'essentiel du travail réalisé, notamment les résultats clés obtenus grâce aux calculs ab-initio sur les différents matériaux choisis. Nous présenterons les courbes caractéristiques importantes, accompagnées des analyses et des commentaires correspondants. De plus, nous aborderons la modélisation multiphysique à l'aide d'Ansys d'un actionneur électrothermique dans le but de remplacer le matériau de base (polysilicium) par un autre alliage demi-Heusler.

En conclusion, nous récapitulerons les points essentiels abordés dans ce travail. Nous soulignerons les résultats les plus marquants obtenus tout au long de l'étude. De plus, nous proposerons des pistes pour de futures explorations afin d'ouvrir des perspectives prometteuses pour les travaux futurs.

Chapitre I : Principes fondamentaux des microsystemes électromécaniques et les actionneurs

I.1 Introduction

Après l'émergence du processus de micro-usinage, qui implique l'usinage de surfaces sur un substrat en silicium, le concept de microsysteme a émergé dans les années 1980. Les technologies des microsystemes visent à intégrer les fonctions telles que les capteurs, les actionneurs et le traitement du signal en une seule entité.

Ce concept trouve ses racines dans l'idée ancienne de fabriquer des composants électroniques, mécaniques, chimiques ou optiques à l'aide de procédés collectifs de microélectronique et de techniques d'assemblage. Les avantages de cette approche incluent la miniaturisation, la fiabilité et la réduction des coûts [1].

Le terme MEMS est l'acronyme de Micro Electro-Mécaniques Systems (Systèmes Micro-Électro-Mécaniques). Comme leur nom le désigne, ce sont des machines ou des structures mécaniques de dimensions extrêmement réduites, de $0,1\ \mu\text{m}$ à quelques millimètres. Ces systèmes électromécaniques se composent de capteurs qui permettent d'acquérir des données provenant du l'univers externe, d'un élément électronique chargée du traitement des données et d'actionneurs qui interagissent avec l'univers extérieur [2,3].

Les caractéristiques électriques et mécaniques des composants micro électromécaniques sont largement étudiées et comprises. Bien que leur conditionnement et leur fiabilité ne soient pas encore pleinement matures, leur potentiel dans de nombreuses applications, telles que les télécommunications, les domaines militaires et autres, en fait des dispositifs critiques pour la recherche et le développement [4].

I.2 Etat de l'art et historique

Le concept des électrodes interdigitales remonte à une conception initiale présentée dans le brevet de N. Tesla en 1891 [5].

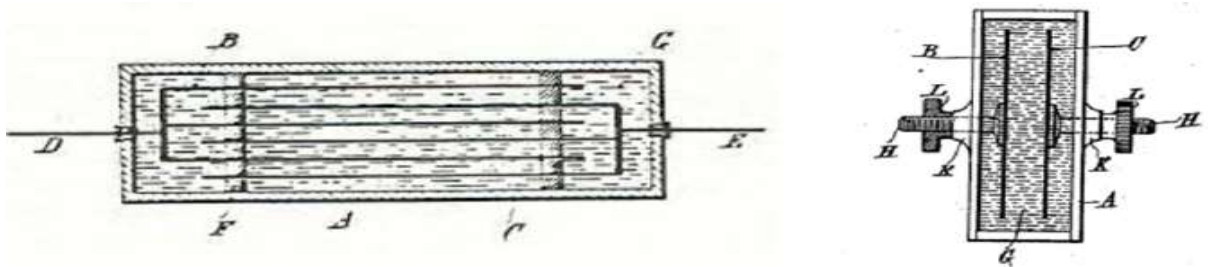


Figure I.1 : Conception du condensateur de Tesla avec plaque interdigitale [1].

Les électrodes interdigitales sont utilisées de manière omniprésente dans divers domaines tels que les systèmes micromécaniques (MEMS), la détection chimique, l'acoustique piézoélectrique et la biotechnologie, ... [6].

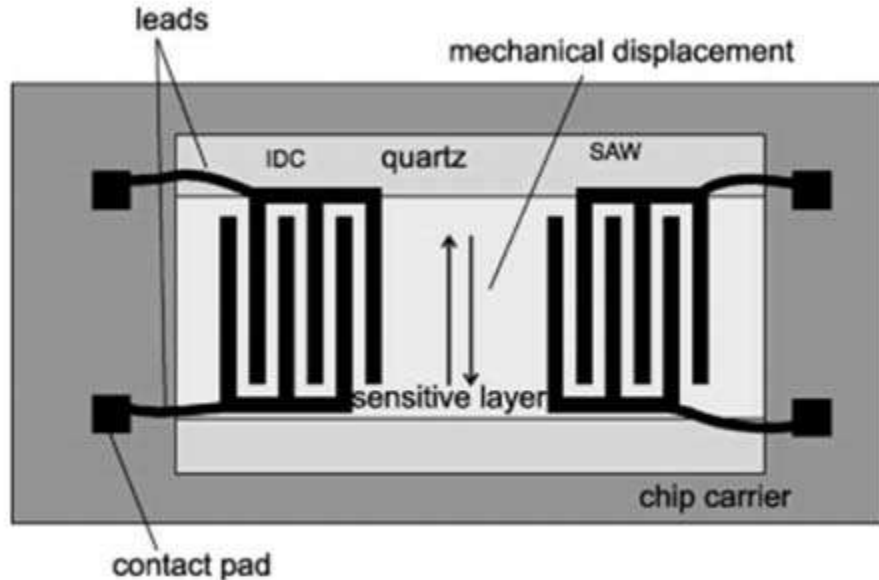


Figure I.2 : Un exemple de conception moderne de capteur – transducteur [1,2].

Le récit des microsystèmes trouve ses origines dans un séminaire exposé par le professeur Feynman lors de l'assemblée annuelle de l'American Physical Society en décembre 1959, qui a marqué un jalon important dans le développement de ce domaine. Le titre de sa conférence, "There's Plenty of Room at the Bottom" ("Il y a plein d'espace en bas"), indiquait l'intention de "Feynman" susciter l'attention sur les possibilités offertes par la miniaturisation. Il soulignait que la réduction de taille d'un système ne se limitait pas à son volume physique, mais ouvrait la voie à une augmentation des fonctionnalités ou de la capacité de stockage d'informations de ce système. Effectivement, Richard Feynman fut l'un des premiers à aborder le processus des micromachines et à saisir son importance ainsi que les défis soulevés par la physique et la mécanique à petite échelle. Sa vision pionnière a ouvert la voie à des avancées significatives dans le domaine des microsystèmes et a participé à stimuler la recherche et l'amplification de technologies basées sur les petites dimensions [1].

Les MEMS ont été créés dans les années 1970 comme une extension de la microélectronique, et leur initiale commercialisation a eu lieu dans les années 1980 où les capteurs en silicium ont précipitamment remplacé les conceptions plus vieilles. Ces capteurs de pression ont joué un rôle crucial et continuent de représenter une part significative du marché des MEMS. Depuis

cette date, les MEMS ont connu une croissance considérable et continuent d'avancer, avec des saillies constantes dans divers domaines d'application [1].

Il s'agit d'un axe de recherche en pleine expansion qui mélange l'utilisation de techniques électroniques, informatiques, chimiques, mécaniques et optiques. Les MEMS sont généralement fabriqués à partir de silicium, mais des composés supplémentaires sont également utilisés en fonction de leurs propriétés physiques adaptées à certains domaines, tels que les métaux, les matériaux piézoélectriques et une variété de polymères. Cette diversité de matériaux permet d'exploiter un large éventail de fonctionnalités et d'applications pour les MEMS.

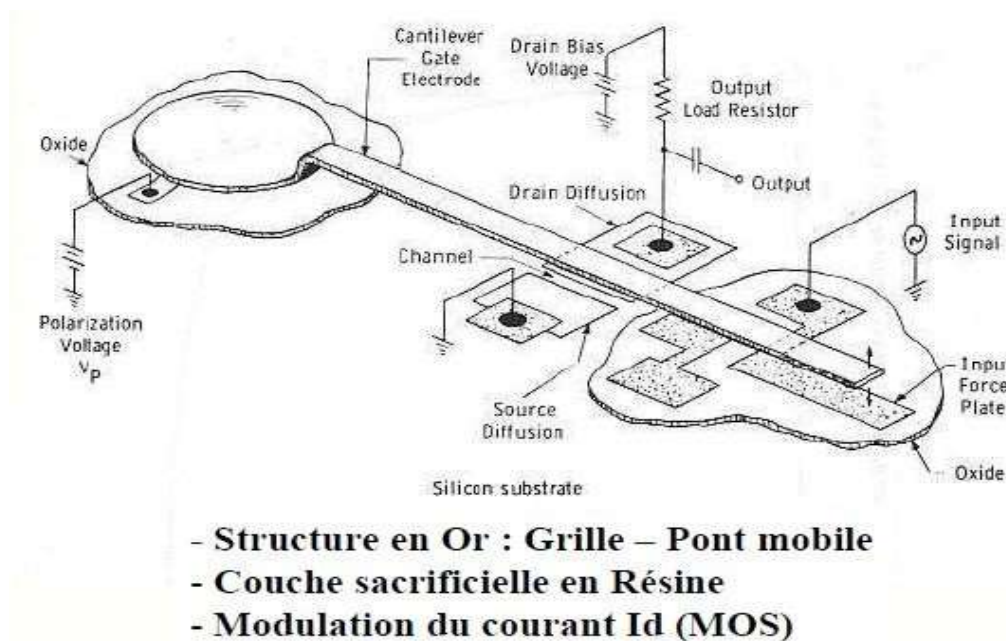


Figure I.3 : Grille résonnante d'un transistor MOS [3].

I.3 Interprétation

Un microsystème électromécanique (MEMS) est un système miniature composé d'un ou plusieurs éléments mécaniques qui utilisent une source d'énergie électrique pour exécuter des fonctions de capteur et/ou d'actionneur. L'expression "microsystèmes électromécaniques" est l'équivalent français de l'abréviation MEMS (Micro Electro Mechanical Systems). Les MEMS combinent des composants microélectroniques, mécaniques et électromécaniques pour réaliser des fonctionnalités diverses dans un format miniature. Ils trouvent une utilisation répandue dans plusieurs domaines, en particulier dans l'électronique, biotechnologie, les télécommunications, l'automobile, etc... [8].

En effet, le MEMS peut être défini comme un petit objet qui comprend à la fois un composant électrique (et/ou électronique) et un composant mécanique qui sont interconnectés et fonctionnent de manière coordonnée.

Les MEMS sont en effet issus de la technologie de la microélectronique et leur fabrication fait appel à la micro-technologie, une production à grande échelle est rendue possible. Les microsystèmes sont énormément utilisés dans plusieurs domaines tels que l'automobile, l'aéronautique, la médecine, la biologie et les télécommunications. Leurs applications sont également présentes dans des produits de consommation courante tels que certains vidéoprojecteurs, et les coussins de sécurité pour automobiles ("Airbags"). Leur miniaturisation, leur faible consommation d'énergie et leur capacité à intégrer des fonctionnalités électroniques et mécaniques en font des composants clés pour les avancées technologiques dans de nombreux secteurs [1,2].

Les microsystèmes sont des systèmes multitâches qui regroupent différentes fonctionnalités dans un seul ensemble compact. Voici un résumé des principales fonctions que les microsystèmes peuvent offrir [1] :

- ✓ Capteurs : Les microsystèmes intègrent souvent des capteurs qui sont capables de détecter différentes paramètres physiques comme la température, la pression, l'accélération, la lumière et ainsi de suite. Ces capteurs convertissent les signaux physiques en signaux électriques exploitables,
- ✓ Actionneurs : Les microsystèmes peuvent également comporter des actionneurs qui transforment des signaux électriques en mouvements mécaniques. Ils peuvent être utilisés pour réaliser des opérations d'ouverture ou de la fermeture de vannes, le déplacement de micro-miroirs, la génération de vibrations, etc...,
- ✓ Traitement du signal : Les microsystèmes intègrent souvent des circuits électroniques qui traitent les signaux captés par les capteurs, les amplifient, les filtrent ou les convertissent en d'autres formes pour être utilisés dans des applications spécifiques,
- ✓ Communication : Certains microsystèmes sont équipés de composants de communication tels que des antennes, des transmetteurs ou des récepteurs, leur permettant de communiquer avec d'autres dispositifs ou systèmes externes.
- ✓ Stockage de l'énergie : Les microsystèmes peuvent inclure des composants pour stocker l'énergie, tels que des batteries, des condensateurs ou des supers condensateurs, pour alimenter les différentes fonctionnalités du système.
- ✓ Contrôle et régulation : Les microsystèmes peuvent comporter des mécanismes de

contrôle et de régulation pour ajuster et maintenir les paramètres et les performances du système dans des limites spécifiées.

La partie mécanique est liée aux données du monde physique (Figure I.4) [9].

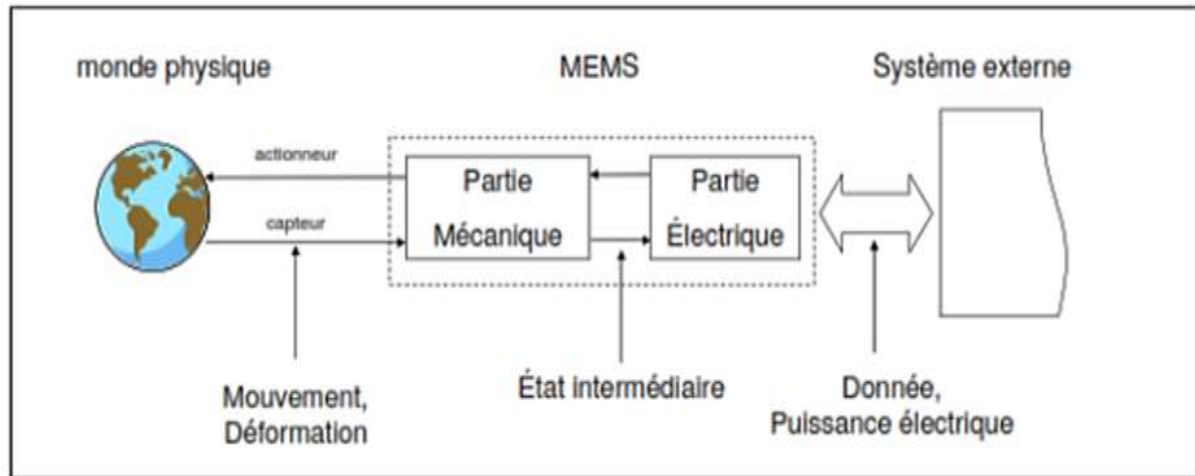


Figure I.4 : L'environnement d'un MEMS.

Elle remplit les fonctions de capteur, de collecteur d'énergie ou d'actionneur par le mouvement ou la déformation. Le composant électrique ou électronique est en charge du traitement des commandes ou du signal.

Certains MEMS n'ont pas de composants mécaniques, mais comme ils convertissent certains signaux mécaniques en signaux électriques ou optiques, ils sont classés comme MEMS.

En Europe, les MEMS sont plus fréquemment connus sous le nom de technologie de microsystèmes (MST ou MS), micro-ingénierie en Angleterre, MEMS aux USA et au Japon, on parle de micromachines [1,10].

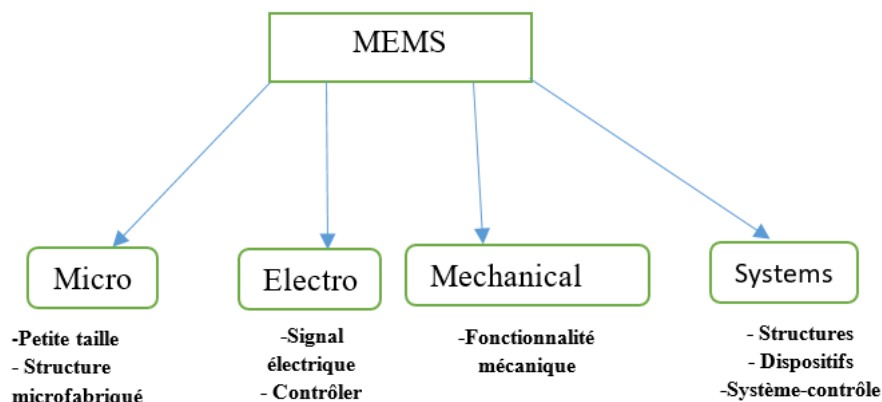


Figure I.5 : Définition de la notion de MEMS / Microsystèmes [1].

La technologie MEMS est considérée comme une forme étendue de fabrication de circuits intégrés (IC) traditionnels. La principale différence entre la technologie traditionnelle de fabrication de circuits intégrés (VLSI) et MEMS réside dans le fait qu'en utilisant les MEMS,

on peut non seulement fabriquer des composants électriques tels que des condensateurs et des inducteurs, mais également des composants mécaniques tels que des engrenages, des ressorts, des poutres, etc. En utilisant la technologie IC traditionnelle, on ne peut fabriquer que des semi-conducteurs, des isolants, des diodes et des transistors.

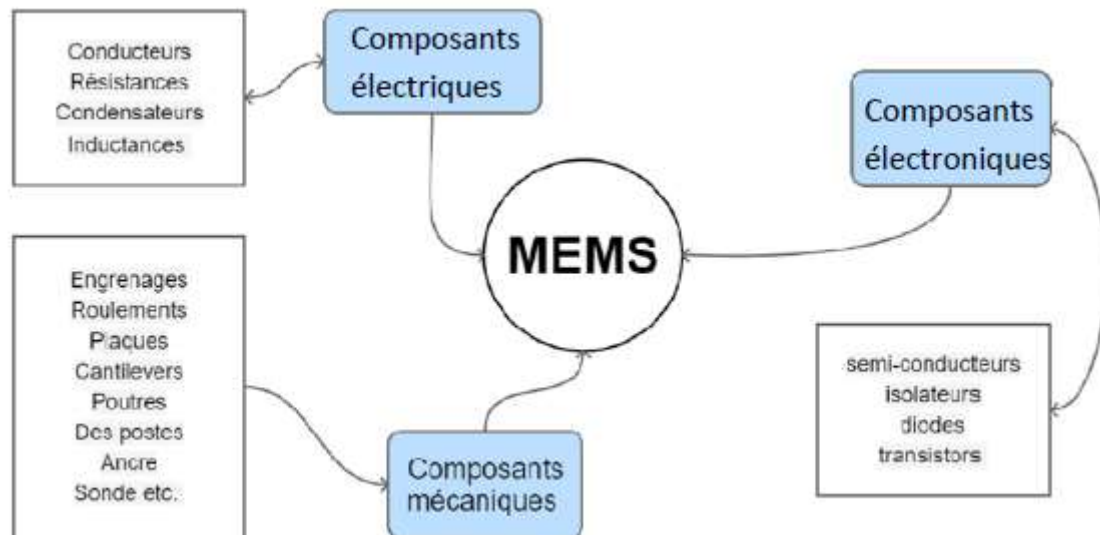


Figure I.6 : les composants de MEMS [3].

I.4 Exploration des avantages et dimensions des microsystèmes

Les microsystèmes, également connus sous le nom de MEMS, présentent un intérêt majeur en raison de leur légèreté, de leur compacité et de leur coût abordable. En outre, ces systèmes se distinguent par leur polyvalence, offrant des fonctionnalités, de stockage, de communication et d'actionnement. Ils sont équipés d'un processeur capable de réaliser des calculs et peuvent être dotés de logiciels qui apportent une certaine intelligence à l'ensemble [1,3].

La dimension physique des dispositifs MEMS peut aller de 20 micromètres à un millimètre.

Ils sont constitués de composants d'une taille comprise entre 1 et 100 micromètres.

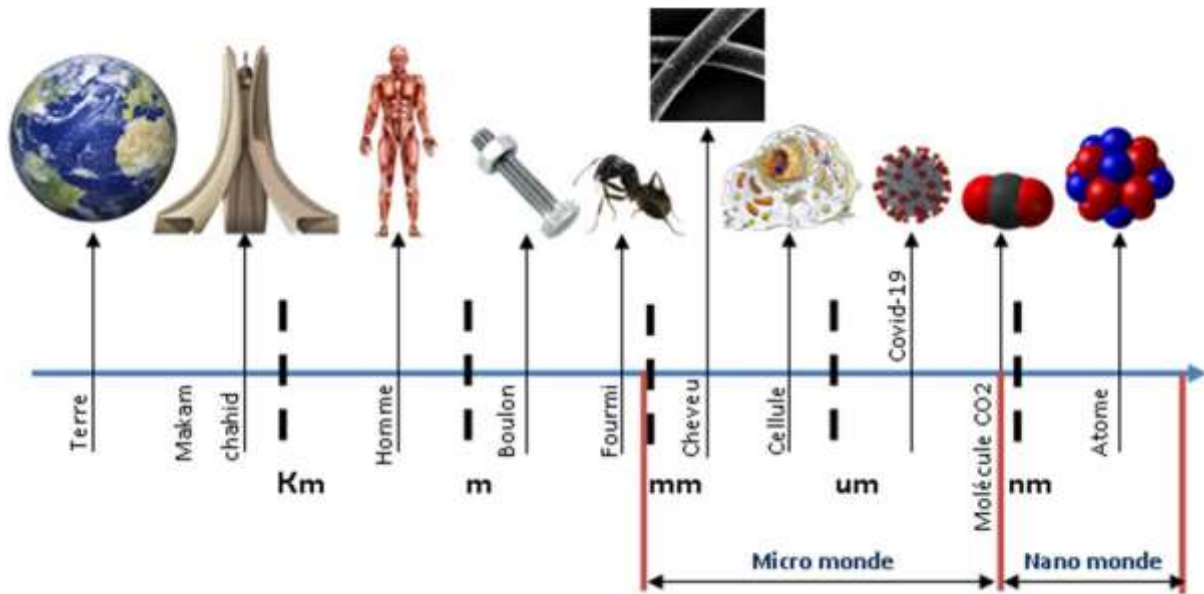
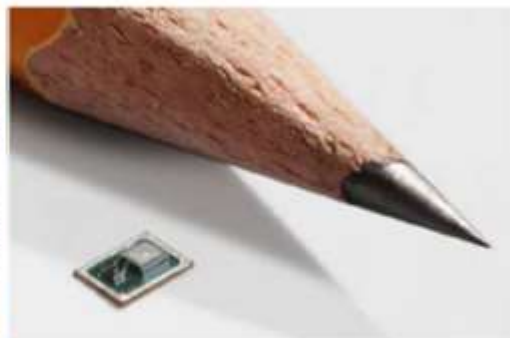


Figure I.7 : Ordre de grandeur [10].

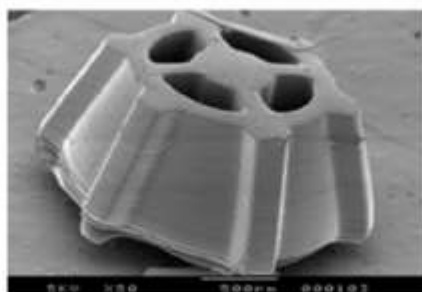
Alors que les composants individuels peuvent être plus petits que la largeur d'un cheveu humain, plusieurs modules disposés en réseaux peuvent occuper une surface supérieure à 10 centimètres carrés (figure I.8).



Un microscope électronique montre la structure de silicium finement gravée d'un capteur d'accélération Bosch



MEMS microphones



Engrenage conique fabrique en μ SL

Figure I.8 : Tailles des MEMS [4,10].

I.5 Réduction et miniaturisation des Microsystèmes

La miniaturisation des circuits électroniques, capteurs et microsystèmes permet de développer des systèmes de mesure électroniques connectés peu intrusifs et envisageant de nombreuses applications nouvelles (santé, traçabilité, sécurité...). Probabilité de voir se développer une « atmosphère intelligente » basée sur des objectifs de mesure les communications distribuées impliquent des innovations importantes dans la conception et l'intégration technologique de microsystèmes fiables et compacts. Le développement des techniques d'intégration de dispositifs primaires dans de nouvelles applications industrielles doit être basé sur des efforts technologiques à trois niveaux :

- ✓ les composants que nous devons contrôler totalement dans leur comportement basses et hautes énergies,
- ✓ les architectures de microsystèmes intégrés,
- ✓ l'intégration de technologies très hétérogènes.

La miniaturisation ne peut se limiter à un seul domaine scientifique ou technologique puisque, par définition, Cela exige la prendre en compte de nombreux aspects physiques et technologiques. Elle fait aujourd'hui l'objet de recherches futures, tant théoriques que pratiques. La miniaturisation offre les avantages suivants :

- Miniaturisation et allègement
- Réduire la quantité d'énergie utilisée
- Optimisation des performances (vitesse, sensibilité...)
- Fabrication en masse de composants
- Réduction des prix
- Acquisition de nouvelles propriétés et fonctionnalités
- Motivations en recherches : exploration d'objets de plus petite taille
- La présence de certains événements physiques
- Hautes fréquences de fonctionnement
- Excellente fiabilité mécanique

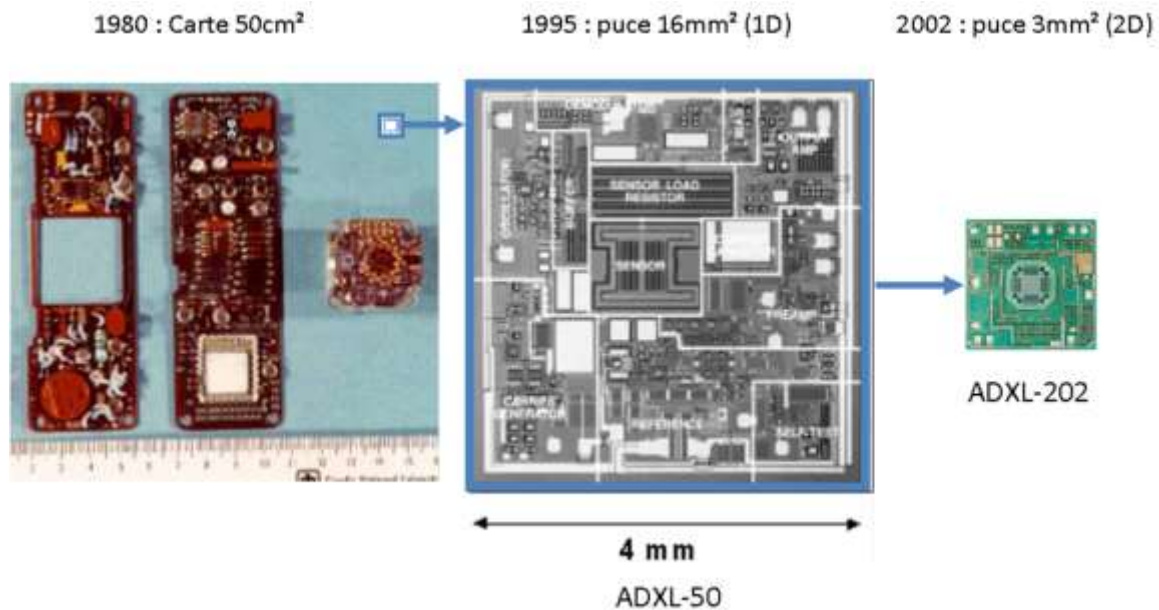


Figure I.9 : L'accéléromètre (Airbag) Technologie issue des C.I [1].

I.6 Procédé et composants clés de MEMS

Ce concept trouve principalement son inspiration dans les axes de la microélectronique, de la mécanique des structures et de l'électronique de transduction (capteur ou actionneur), comme illustré dans la figure suivante.

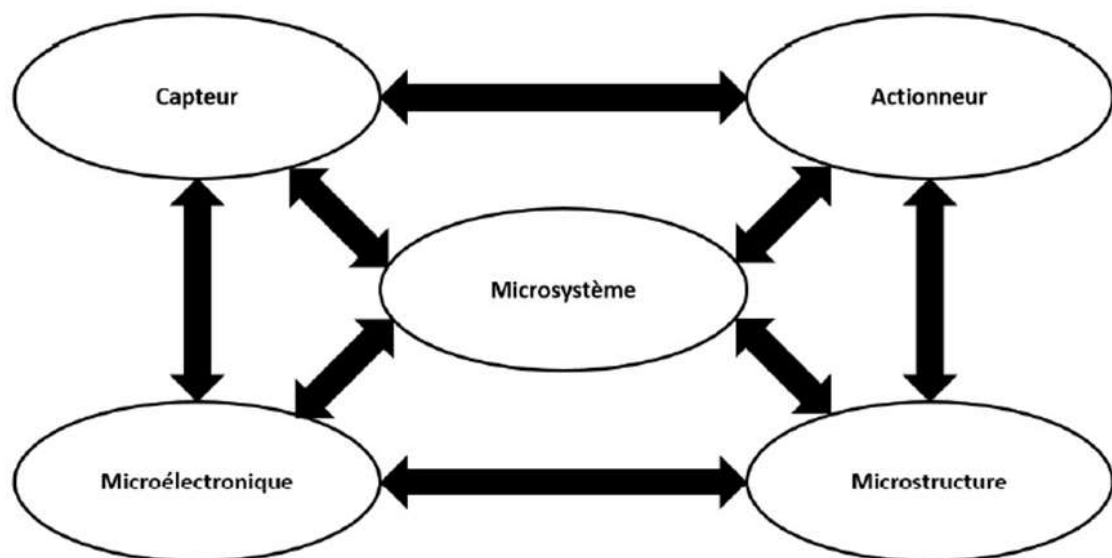


Figure I.10 : Base de conception des microsystèmes [20].

Le terme "microsystème" désigne un système de petite taille fabriqué à l'aide de procédés collectifs qui intègrent au moins deux des fonctions suivantes :

MEMS = 1,2 ou 3 éléments de la chaîne suivante [14].

- **Fonction capteur** convertit une grandeur non électrique, telle que la pression ou la température, en un signal électrique, tel qu'une tension, un courant ou une charge.

La grandeur à mesurer est appelée "mesurande" et est représentée par "m". Le capteur a pour fonction de convertir "m" en une grandeur électrique appelée "mesure" ou "s". La relation entre "s" et "m" est souvent dépendante d'autres grandeurs physiques liées à l'environnement, telles que "la température", "l'humidité", etc. Ces grandeurs sont appelées "grandeurs d'influence" [15].

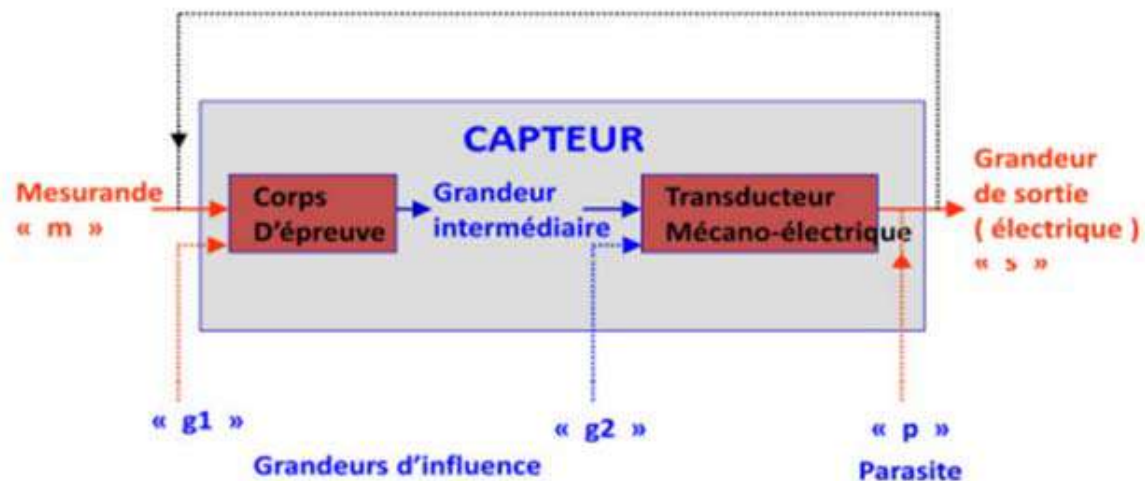


Figure I.11 : Représentation modulaire d'un capteur [6].

- **Fonction traitement** (analogique ou numérique) Le signal électrique issu du capteur, qui est souvent inexploitable en raison de sa faible amplitude, de sa déformation et de sa présence de bruit, est transformé en un signal utile par le biais d'amplification, de filtrage, de modulations, etc.
- **Fonction actionneur** (transducteur de sortie) Le capteur convertit un signal électrique en une grandeur non électrique qui peut être interprétée par un opérateur, telle qu'un affichage ou un enregistrement. Il peut également entraîner une action sur l'environnement externe, comme un mouvement moteur, par exemple.

Le choix du principe d'actionnement le plus approprié dérive de nombreux facteurs, tels que :

- L'effort souhaité
- La quantité de mouvement recherchée
- La dimension
- La vitesse...

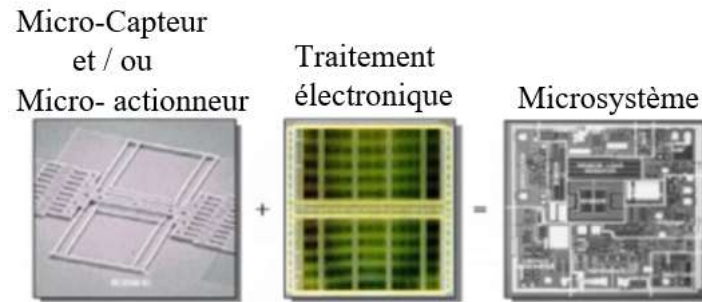


Figure I.12 : définition de microsystème (MEMS) [6].

I.7 Les diverses familles des MEMS

MOEMS ("Micro-Opto-Electro-Mechanical Systems") est une famille de MEMS utilisée dans le domaine de l'optique. Les RF-MEMS ("Radio Frequency-Micro-Electro-Mechanical Systems") sont des MEMS conçus pour commutation des fréquences radio. Les BIO-MEMS sont des MEMS spécifiquement utilisés dans l'axe de la biologie, notamment pour les applications de "lab-on-chip" (laboratoire sur puce). Enfin, MAGMAS (Magnetic Micro-Actuators and Generators), également connu sous le nom de MAGnetic Micro-Actuators & Systems, est une famille de MEMS qui se concentre sur les micro-actionneurs et les générateurs magnétiques. C'est une grande famille, même si elle ne partage plus qu'un petit nombre de biens industriels ou grand public. Têtes d'impression, capteurs d'airbag, matrices actives de miroirs dans les vidéoprojecteurs, têtes de disque dur... n'en sont que quelques exemples.

Parce qu'il y a plusieurs développements à faire pour identifier et stabiliser de nouveaux concepts, produire de nouveaux matériaux ou construire de nouveaux logiciels de simulation, ce domaine reste extrêmement proche de la recherche [16].

Le domaine des MEMS est fortement pluridisciplinaire ; Contrairement à la microélectronique, les dispositifs microsystèmes couvrent un large éventail d'applications, telles que :

- Micro-capteurs.
- Micro-actionneurs.
- Bio-MEMS.
- MEMS RF. (Radio-Frequency-Micro-Electrical-Mechanical Systems)
- MEMS Optiques.
- Micro-fluidique
- MEMS acoustiques.
- Micro-TAS (chimiques).
- MEMS Magnétiques

- Labo On Chip.

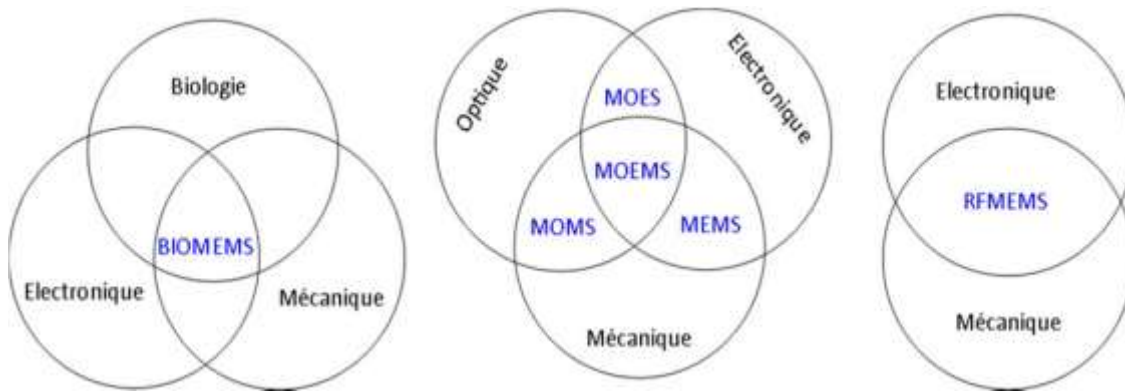


Figure I.13 : Les domaines d'application des MEMS.

I.8 Secteurs d'attentions des microsystèmes

Les MEMS trouvent des attentions dans divers domaines où une réduction considérable des coûts, de la taille et du poids, ainsi qu'une amélioration de la fiabilité et des performances sont requises. Les secteurs clés comprennent notamment :

I.8.1 L'industrie automobile :

L'industrie automobile est l'un des principaux axes d'application des MEMS, bénéficiant des avantages offerts par ces technologies en termes de coût, d'intégration, de taille et d'encombrement. De plus, les microsystèmes permettent une interrogation à distance, comme c'est le cas avec les capteurs de pression dans les roues qui utilisent la communication par radiofréquence [1,4].

La figure suivante illustre les diverses possibilités d'exploitation des microsystèmes dans le secteur automobile :

La sécurité : le déclenchement des airbags et le suivi de la pression des pneus via des capteurs télé-interrogés, ainsi que l'incorporation de systèmes optiques intelligents.

Les suspensions actives : dans le domaine automobile tirent parti de l'intégration de centrales inertielle et d'inclinomètres dans les essieux.

Les systèmes d'anti-patinage : utilisent également des gyroscopes pour améliorer leurs performances.

La pollution : intégration des capteurs de gaz : CO ("monoxyde de carbone"), et le CO₂ ("dioxyde de carbone") dans les systèmes d'échappement.

La propulsion : les capteurs de pression, de température, de débit, et d'autres encore, pour optimiser leur fonctionnement et améliorer les performances du système.

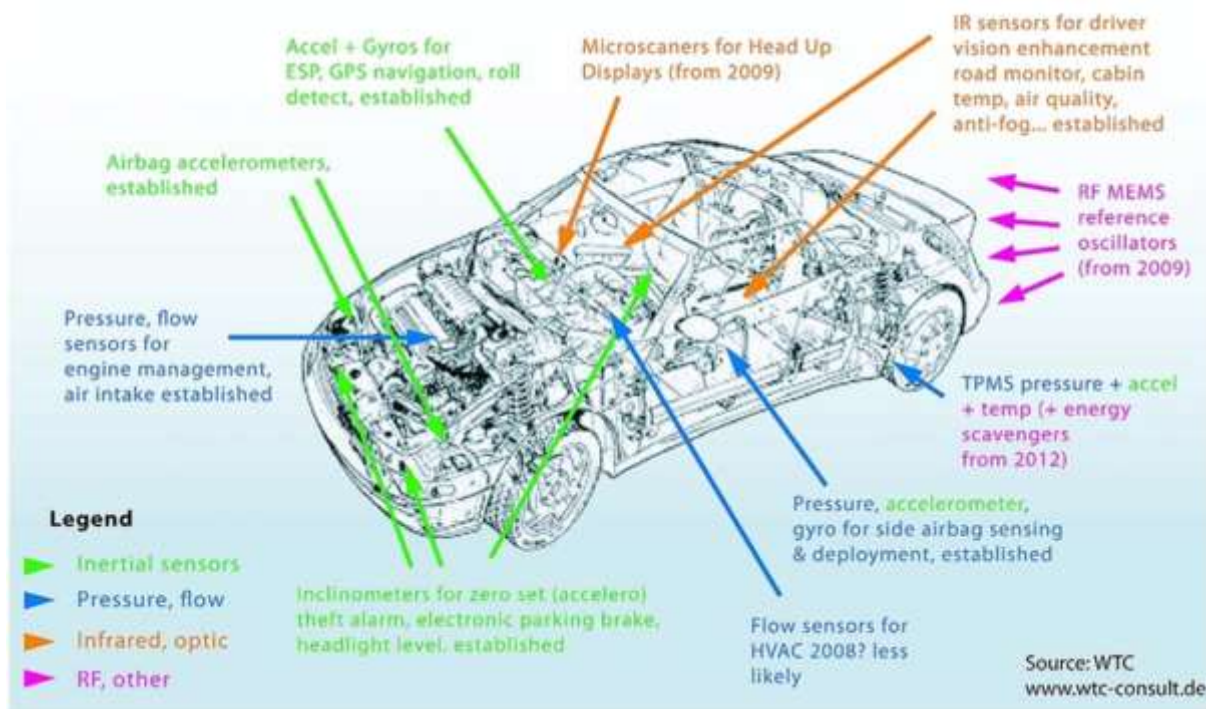


Figure I.14 : les microsystèmes dans l'automobile [1].

I.8.2 Le secteur spatial

Les microsystèmes ont beaucoup d'applications envisageables dans l'aérospatial, car les aspects de miniaturisation et de fiabilité sont très importants dans les satellites.

Pour que le fonctionnement d'un microsystème dans un satellite ne soit pas perturbé, il devra résister aux radiations importantes présentes dans l'espace [1,18].

La figure suivante illustre les attentions microsystèmes dans les satellites, qui sont listées comme :

- accéléromètre, gyroscope...
- capteurs de terre, capteurs d'étoiles.
- micro-propulseurs.
- matrices de micro-miroirs.
- thermopiles, bolomètres...

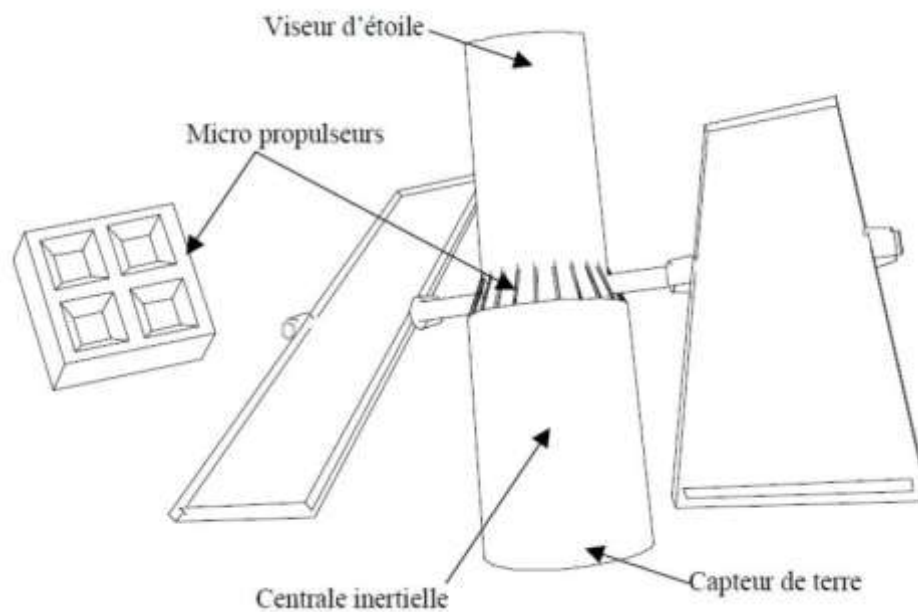


Figure I.15 : Les microsystèmes dans les satellites [1,2].

I.8.3 L'industrie aéronautique

Ce secteur est fortement tributaire des capteurs fabriqués en technologie microsystèmes. Les microsystèmes offrent principalement des avantages en ce qui concerne la miniaturisation et la baisse des prix des capteurs, ce qui permet d'accroître leur utilisation. Cela augmente la sécurité et la fiabilité des avions. Il est ainsi envisageable d'implanter un réseau de capteurs dans les ailes des avions afin de mesurer la pression, les contraintes matérielles et la température à différents points. Cette installation permettrait une assistance accrue au pilotage et une meilleure compréhension des conditions aérodynamiques [1].

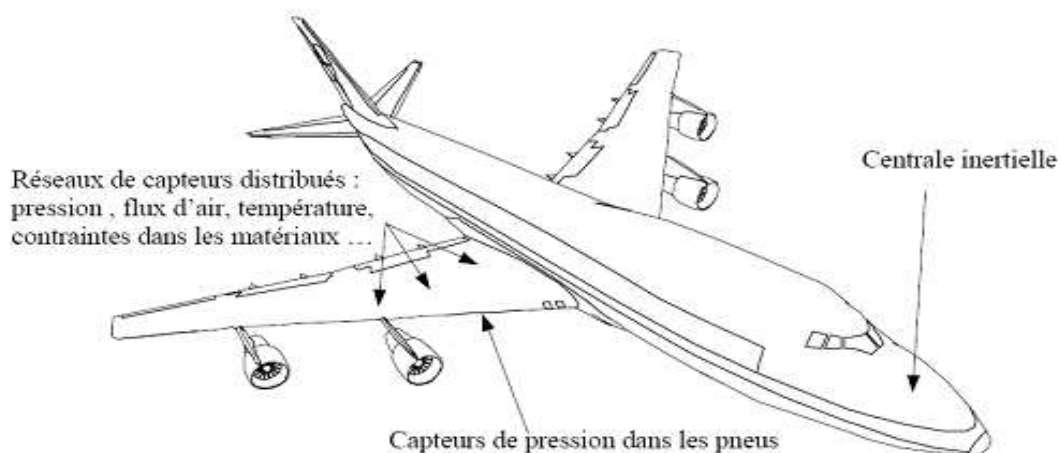


Figure I.16 : Les microsystèmes dans l'avionique [1,2].

I.8.4 Le secteur biomédical

En raison de la biosensibilité du silicium et de la géométrie réduite des MEMS, les microsystèmes sont extrêmement importants dans le domaine biomédical. Des systèmes de "capteurs" et "d'actionneurs" qui peuvent être insérées à l'intérieur du corps humain et interrogés à distance sont possibles [1,17]. Les applications envisagées se décomposent en quatre modes principaux :

I.8.4.a Mesure pour le diagnostic

-Pilules intelligentes

I.8.4.b L'instrumentation de microchirurgie

- Micro scalpels et micro-pinces

- Endoscopie et imagerie

I.8.4.c Systèmes actifs implantables [2,4]

-les systèmes de vérification de grandeurs tels que l'écoulement du sang, le "PH" des fluides gastriques ou la "pression artérielle", procédés qui sont associés à des mécanismes d'injection machinale de médicaments,

- Applications envisagées incluent des systèmes de stimulation nerveuse visant à restaurer le mouvement des membres inférieurs ou supérieurs chez les personnes handicapées,

- Les pacemakers sont des dispositifs médicaux qui intègrent des accéléromètres afin de réguler les battements cardiaques en fonction du mouvement physique présumée,

- rétines artificielles, prothèses auditives.



Figure I.17 : Exemples de bio MEMS [11].

I.8.4.d L'analyse biomédicale

- **Les bio-puces :**

Sont des microsystemes utilisés pour effectuer des analyses biologiques à haut débit. Le concept de ces puces est apparu grâce aux avancées en matière de miniaturisation issues de la microélectronique [19].

La bio-puce passe par trois étapes lors de sa conception et validation. Tout d'abord, il est nécessaire d'ancrer les biomolécules sur un appui approprié, qui doit satisfaire aux exigences de chimie de fixation ainsi qu'à la méthode employée pour analyser les interactions biomoléculaires. La seconde étape du processus consiste à valider la bio-puce en l'utilisant avec des modèles préalablement établis et bien connus. Cela permet de vérifier son bon fonctionnement et sa fiabilité en comparant les résultats obtenus avec les connaissances déjà établies. Cela permet de vérifier son fonctionnement et de s'assurer de sa fiabilité et de sa précision. La troisième étape vise à évaluer les performances de la puce par rapport à la nature des échantillons à analyser. Il s'agit de déterminer si la puce est adaptée aux spécificités des échantillons et de vérifier sa capacité à être réutilisée pour d'autres analyses [5].

Puces à ADN : Les systèmes dont il est question sont conçus pour effectuer simultanément Plusieurs milliers d'analyses génétiques sont réalisées sur un échantillon donné de petite taille. Le fonctionnement de ce processus repose sur l'exploitation d'une série de sondes nucléiques disposées en matrice sur une petite puce. Ces sondes, fixées sur un substrat, interagissent avec l'échantillon à analyser en formant des paires de brins d'ADN complémentaires. Cela permet de retenir et de fixer les brins d'ADN sur le substrat [1,19].

Puces à protéines : Les bio-puces de ce genre offrent la possibilité de détecter et d'analyser de manière rapide et multiparamétrique les protéines. Elles sont extrêmement utiles dans divers secteurs, mais leur évolution a été entravée par la complexité des protéines. Le défi comporte à parvenir à stabiliser ces molécules sur un support tout en préservant leur adaptation et leur fonctionnalité [20].

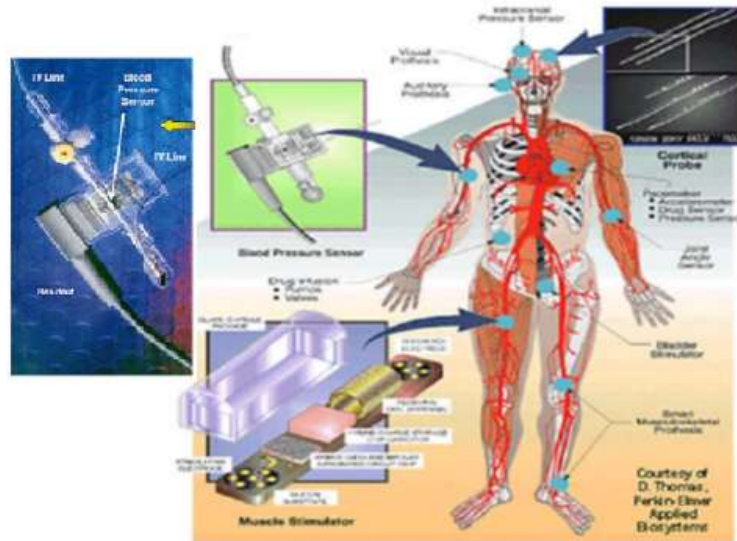


Figure I.18 : Distributeur d'insuline, Bio puce à ADN, Micro pompe [11].

- **La biométrie :**

La biométrie est une discipline scientifique qui vise à identifier de manière unique le corps humain en se basant sur ses caractéristiques intrinsèques. Cela peut inclure des éléments tels que les empreintes digitales, la morphologie du visage, ainsi que les couleurs et les motifs de la rétine [19].

L'image suivante, récapitule les attentions éventuelles des MEMS dans le corps [1,17].

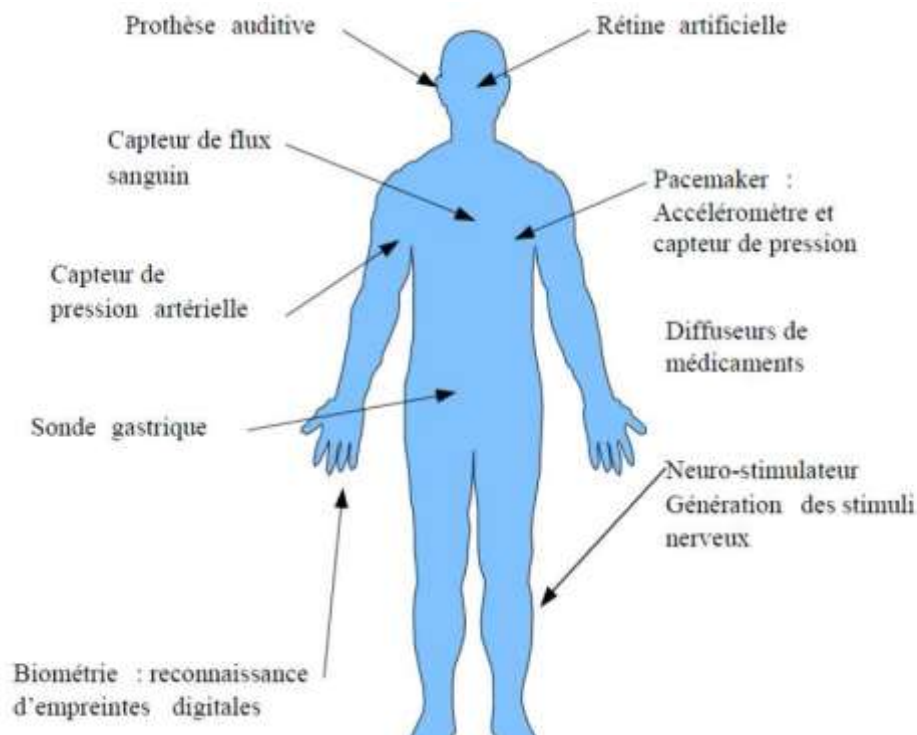


Figure I.19 : Les MS dans le corps [1].

I.8.4.e Le domaine de l'informatique, optique (MOEMS) et de télécommunication (RF MEMS)

En général, les dispositifs MOEMS sont basés sur l'intégration d'un ou plusieurs micro miroirs, et la majorité utilisent des technologies de fabrication et d'emballage relativement matures, et répondent aux besoins divers de nombreux domaines d'application. D'autres sont encore en phase de développement pour améliorer leurs performances afin de répondre aux règles de plus en plus exigeantes.

Dans la figure suivante, nous allons citer un exemple d'un capteur MOEMS :

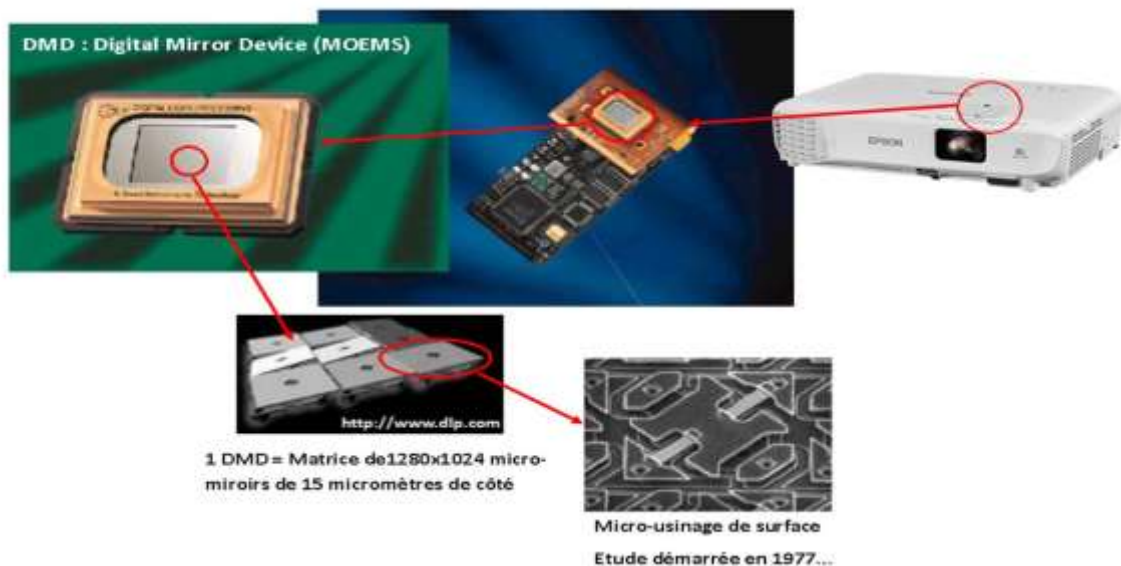


Figure I.20 : projection d'images vidéo : Les systèmes DMD de Texas Instrument et GLV [14].

En raison de leurs performances améliorées, les MEMS RF ont ouvert de nouvelles voies pour les applications de radiofréquence. En effet, le procédé de production des MEMS pour les applications hyperfréquences a évolué et s'est différencié, lui permettant de générer aujourd'hui une large gamme de composants et de circuits. Parmi les bénéfices des RF

MEMS, on peut citer [23] :

- Très faible consommation d'énergie (uniquement dans les phases de déplacement) : l'activation électrostatique ne nécessite pratiquement aucun courant,
- Isolation élevée : Comme les commutateurs RF MEMS sont basés sur un entrefer, ils ont une capacité très faible,

- Dans le cas de commutateurs parallèles, par exemple, les pertes d'insertion sont typiquement d'environ 0,1 dB,
- Une fréquence de coupure extrêmement élevée,
- Un processus de production simple : les MEMS RF sont habituellement créés à l'aide du processus de fabrication des semi-conducteurs et peuvent être générés sur une large gamme de substrats, tels que le quartz, le verre ou le silicium.

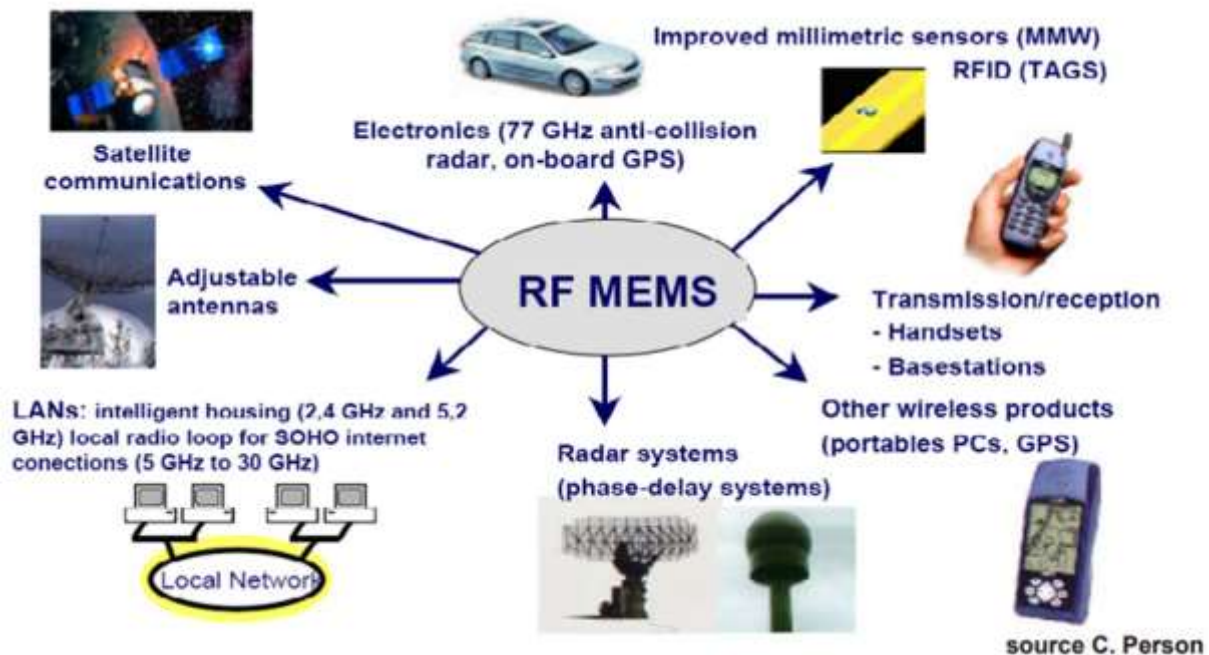


Figure I.21 : Les MEMS-RF [1,15].

I.9 Les micros actionneurs

Les microsystèmes sont principalement destinés aux applications médicales, de défense, de sécurité et de maintenance industrielle en raison de la différence des systèmes de contrôle et de mesure. Les composants fluidiques tels que les vannes et les pompes ont été étudiés pour leur capacité à transférer de petites quantités de produits chimiques et sont fréquemment utilisés dans des applications biochimiques. Il existe un réel besoin de gérer des éléments infimes (préhension, transport, position, orientation, etc.) pour créer des microsystèmes supplémentaires.

L'endoscopie est un autre domaine où les micro-actionneurs peuvent être d'une grande aide.

Enfin, une grande partie des microsystèmes complexes, qui combinent fréquemment de nombreuses technologies, traitent des défis de mobilité dans des espaces contraints.

Un actionneur est un dispositif mécanique qui convertit une demande externe en une action physique (par exemple une force ou un déplacement). Les micro-actionneurs, comme les micro-capteurs, peuvent être classés selon différents critères :

- En fonction de l'effet physique employé pour réaliser la transduction du signal externe.
- Il existe deux types de micro-actionneurs basés sur la conception de la partie mécanique active :
 - Des microstructures rigides qui transmettent des efforts ou des couples par translation ou rotation
 - Microstructures déformables qui transmettent des forces ou des déplacements par déformation (Exemple d'actionneur thermique, Figure I.21).

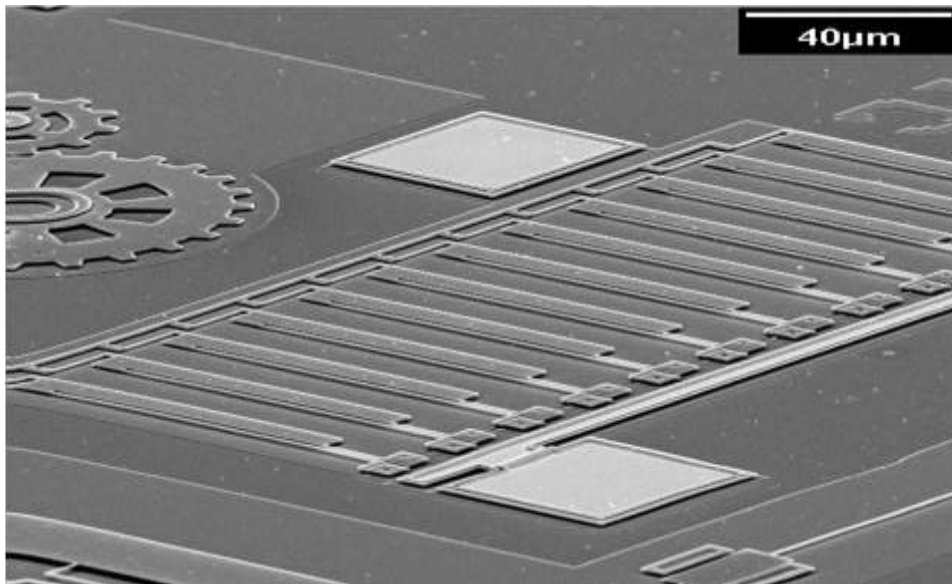


Figure I.22 : Exemple d'un réseau d'actionneurs électrothermiques [1].

La fonction d'un actionneur est de réguler un mouvement à partir des commandes d'un système d'information. Il gère les interversions énergétiques des parties clés du processus.

Un micro-actionneur est prévu pour exécuter les mêmes opérations à plus petite échelle.

Nous reconnaissons aujourd'hui que la création de micro-actionneurs présente des enjeux importants quant à l'évaluation de leur efficacité en termes d'efficacité énergétique ou de performances d'animation, présentant souvent un modeste compromis entre exactitude, amplitude et puissance. Le développement des microsystèmes favorise le développement de micro-actionneurs fiables et performants qui permettent d'accéder à de nouvelles applications.



Figure I.23 : Représentation schématique d'un actionneur.

I.10 Les Différents types d'actionnements

Il est également envisageable de commander l'actionneur d'un dispositif afin qu'il convertisse de l'énergie d'un type spécifique en mouvements contrôlés [1,21].

Les puits d'énergie, qu'on peut user dans le secteur de micro actionnement, rapportent à deux domaines principaux : les champs électriques et les champs magnétiques qui étant appliqués aux masses, génèrent les accélérations ; et les forces moléculaires, déduites par des champs de forces extérieurs ("électrostatique, magnétique, thermique") et amplifiées à l'intérieure même des actionneurs, entraînant leur déformation.

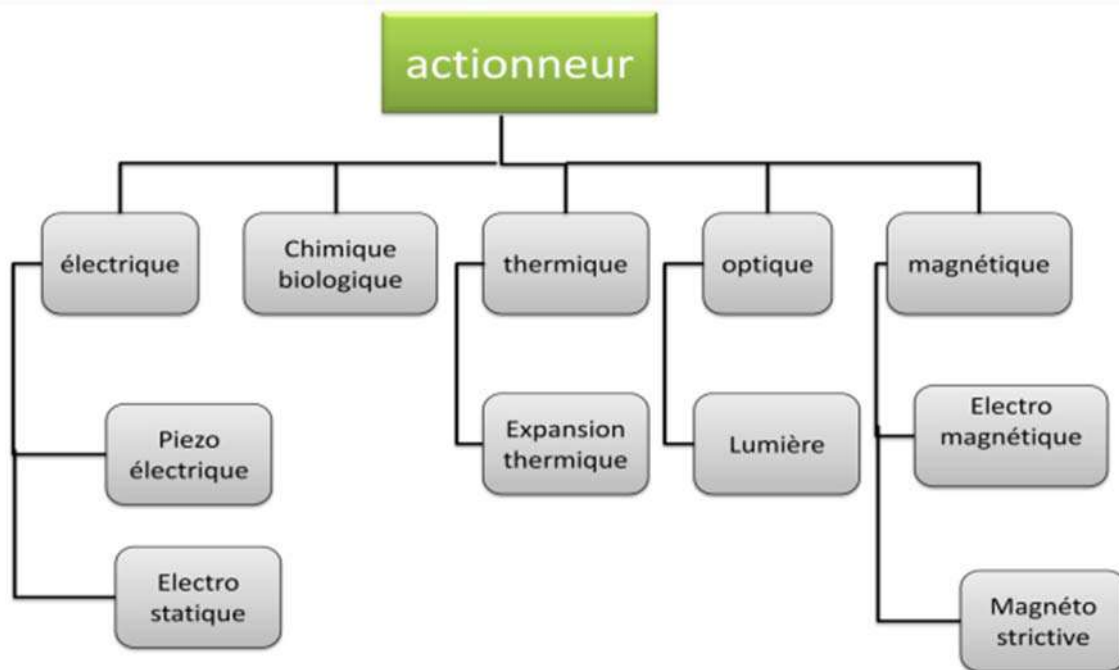


Figure I.24 : Modes d'actionneur.

Cette technologie offre une large gamme de modes d'actionnement, comprenant essentiellement l'actionnement électrostatique, électromagnétique, électrothermique, piézoélectrique, magnétostrictif et l'actionnement à mémoire de forme [22].

I.10.1 Actionnement électrostatique

L'actionnement électrostatique est largement employé dans les microsystèmes en raison de sa facilité d'utilisation. Lorsqu'une tension est appliquée entre deux "électrodes", celles-ci sont soumises à une influence capacitive qui engendre une attirance électrostatique. Les champs électrostatiques permettent aux charges de se former et de disparaître brusquement, ce qui se traduit par des temps de réponse très courts [1].

La force électrostatique peut se manifester de deux façons différentes : à travers un actionneur de type "plaques parallèles" ou à travers un actionneur utilisant des "peignes interdigités" dans un dispositif.

I.10.1.a Actionnement plaques parallèles

La force électrostatique produite est inversement proportionnelle au carré de l'écart entre les électrodes. Afin d'éviter l'utilisation de tensions d'actionnement excessivement élevées, il est nécessaire de maintenir une faible distance de séparation entre les électrodes. Lorsque la tension atteint un seuil critique (tension d'effondrement), la force d'attraction devient plus forte que la force de rappel de la structure. Cela conduit à un état instable à ce stade [7].

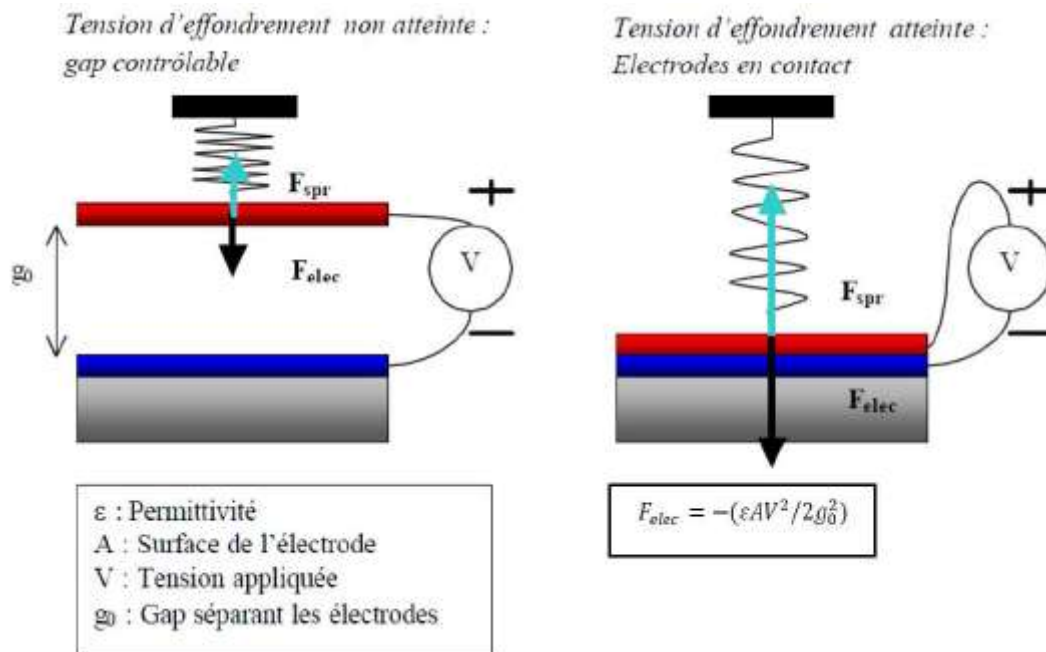


Figure I.25 : Principe d'un actionneur électrostatique de type plaques parallèles [1].

I.10.1.b Actionneur en dispositif à peignes interdigités (déplacement dans le plan)

La force électrostatique produite dépend directement du nombre de dents du peigne et est inversement proportionnelle à la distance entre ces dents. Lorsqu'une différence de potentiel est appliquée entre les deux électrodes, l'électrode mouvant se déplace latéralement par rapport à l'électrode immobile.

L'actionneur à peignes interdigités maintient une force constante pendant le déplacement de l'électrode mobile. Afin d'obtenir une force significative, compte tenu des contraintes technologiques et géométriques telles que l'épaisseur des matériaux et la profondeur des interstices, ce modèle d'actionneur requiert un nombre important de doigts. Néanmoins, il est particulièrement adapté aux déplacements dans le plan [1,7].

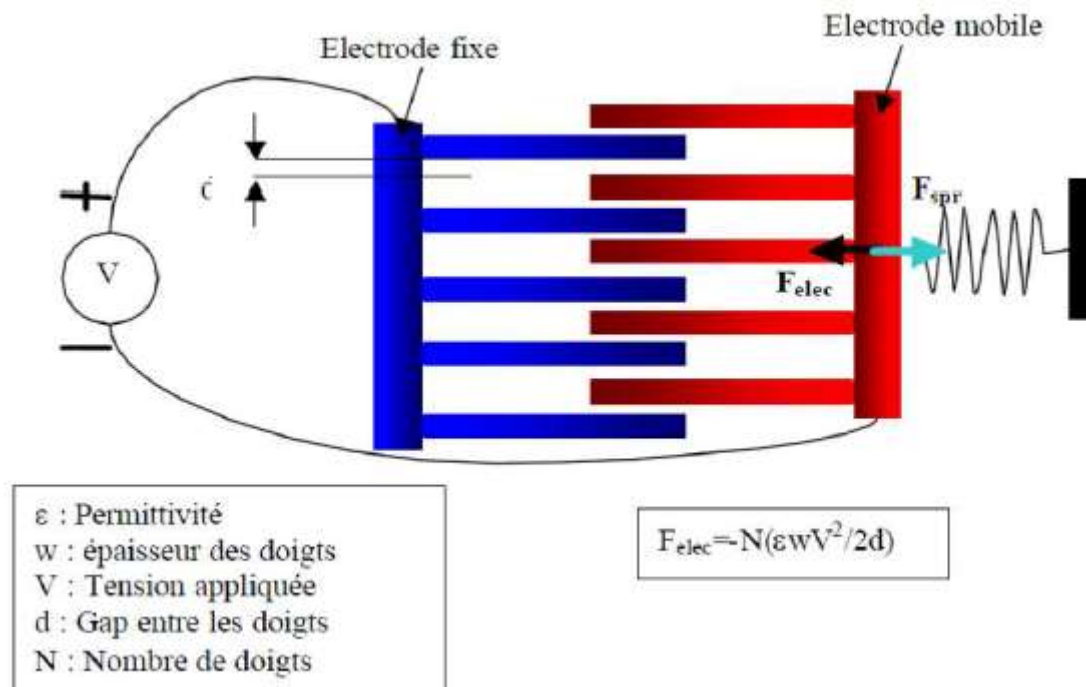


Figure I.26 : Principe d'un actionneur électrostatique à peigne interdigité [1].

I.10.2 Actionneur électromagnétique

Les micromoteurs électromagnétiques offrent des performances motrices remarquables, ce qui les rend essentiels pour la motorisation des micromachines. Cependant, la miniaturisation extrême des moteurs électromagnétiques est limitée par les lois d'échelle. Les forces magnétiques réduisent brusquement lorsque la densité de courant par unité de surface est maintenue constante dans les bobinages. Malheureusement, la chaleur générée par effet "Joule" est dissipée très rapidement dans des composants de petite taille. L'augmentation de la densité de courant permet de compenser les effets défavorables de l'échelle jusqu'à une certaine

dimension, mais cela entraîne généralement une diminution du rendement due à l'accroissement des pertes résistives dans les enroulements [7].

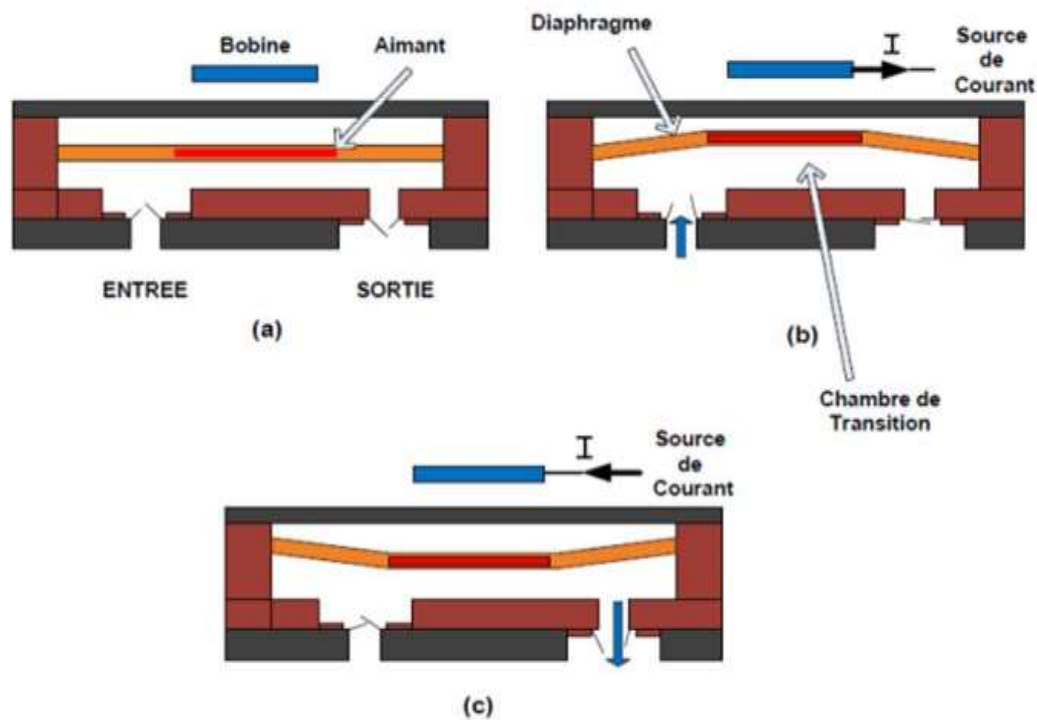


Figure I.27 : Actionneur électromagnétique d'une Micro pompe [1].

(a) état primaire (aucun courant) ; (b) déviation de la membrane en haut (aspiration du liquide) ; (c) déviation de la membrane en bas (pompage).

L'autre moyen d'actionnement consiste à utiliser un aimant pour générer un champ magnétique continu B qui agit sur un conducteur traversé par un courant électrique (Figure I-28). Cette interaction engendre la force de "Laplace" qui permet la flexion et la déviation de la poutre, par exemple.

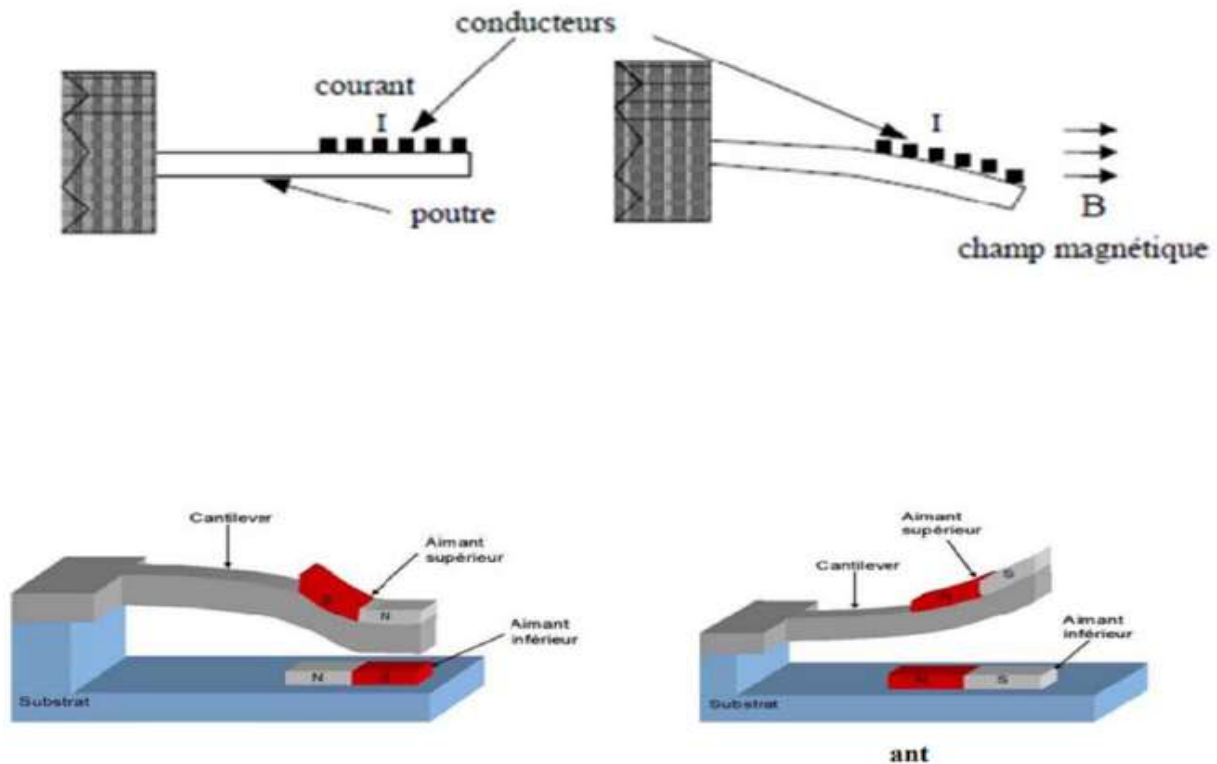


Figure I.28 : Actionneur électromagnétique [19].

La recherche dans la conception de micro-bobines ou micro-inducteurs est l'un des principaux domaines d'étude des micro-actionneurs magnétiques [7].

I.10.3 Actionnement piézoélectrique

La piézoélectricité est la propriété de certains matériaux de se polariser électriquement en réponse à une contrainte mécanique ("effet direct") et de se déformer en réponse à un champ électrique ("effet inverse"). En pratique, un champ électrique se déploie sur une structure mobile qui contient une poutre dont le déplacement de la structure est provoqué par l'application d'une couche de matériau piézoélectrique. La direction est déterminée par le signe de polarisation (figure I.29). Lorsque la polarité est inversée, une contrainte est appliquée à la couche, ce qui entraîne sa contraction et pousse le microfaisceau à se déplacer. Lorsque la contrainte est relâchée, le microfaisceau revient à sa position d'origine. Cette caractéristique est exploitée pour créer des micro-interrupteurs.

Une structure peut être augmentée d'une constante de rigidité par une tension d'activation de l'ordre de 20 V. Les périodes d'activation de ce type de structure sont assez courtes, de l'ordre de la microseconde. Le LZT (Lead Zirconate Titanate) a été le principal matériau piézoélectrique utilisé jusqu'à présent en raison de son coefficient piézoélectrique élevé [1,23].

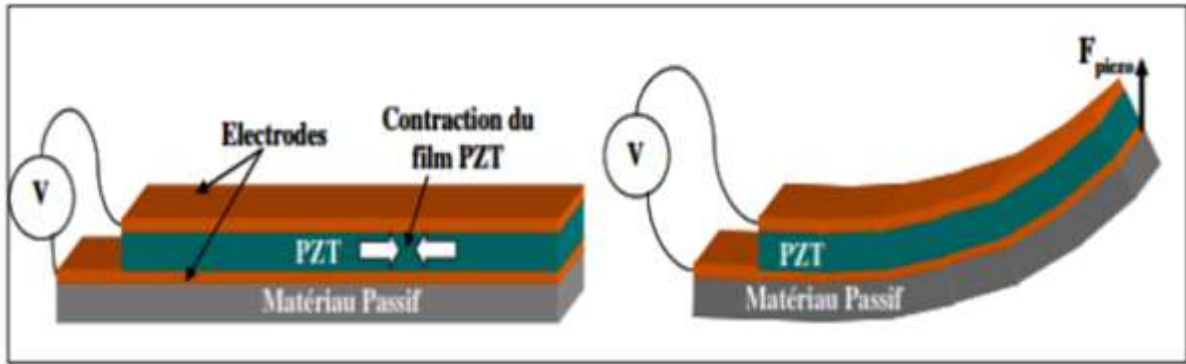


Figure I.29 : Principe d'un actionneur piézoélectrique de type bilame [3].

I.10.4 Actionneur magnétostrictif

Une alternative aux actionneurs électromagnétiques est l'utilisation du principe de magnétostriction, qui est déclenché par un champ magnétique externe. Contrairement aux actionneurs électromagnétiques, ce type d'actionneur est composé de matériaux spécifiques (ferromagnétiques) qui se déforment en réponse à un champ magnétique, sans nécessiter l'introduction d'un courant électrique. Les capteurs de champ magnétique, la mémoire magnétique et les applications de déplacement magnétique exploitent tous les matériaux magnétostrictifs. Cependant, ces matériaux magnétostrictifs ont une déformation limitée, ce qui constitue un inconvénient [1,11].

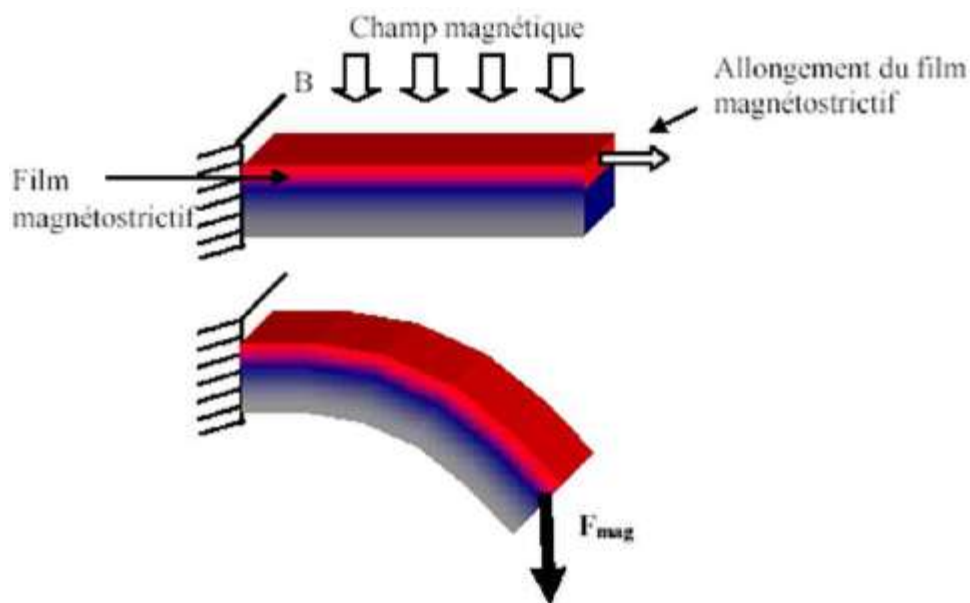


Figure I.30 : Schéma d'un actionnement magnétostrictif [1,4].

I.10.5 Actionneur à mémoire de forme

Les alliages à MF sont une catégorie de matériaux qui, après avoir été déformés de manière permanente à basse température, récupèrent leur forme initiale non déformée lorsqu'ils sont chauffés. Cette propriété est connue sous le nom "effet mémoire de forme". Lorsqu'un AMF retourne à sa forme initiale sous l'effet de la chaleur, il est capable de produire un travail mécanique, ce qui permet d'entraîner une charge. C'est cet effet de transduction thermomécanique qui est exploité lorsqu'un AMF est utilisé en tant qu'actionneur [8].

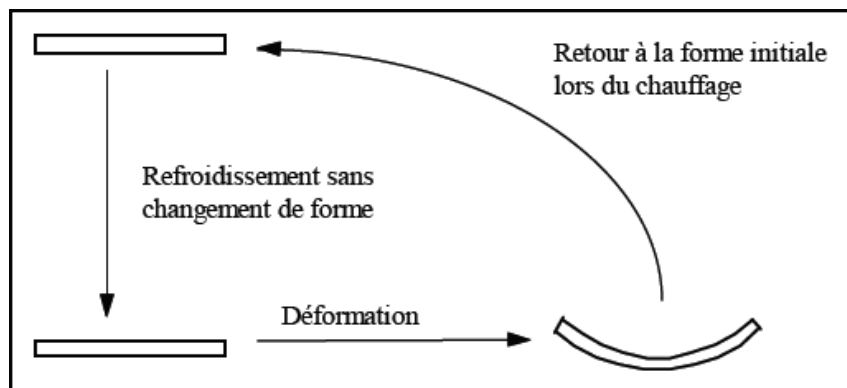


Figure I.31 : AMF déformé [18].

Il est nécessaire d'ajouter un élément mécanique de rappel ou que le matériau à mémoire de forme soit éduqué pour utiliser ce type d'actionnement.

En effet, un élément AMF doit avoir subi une déviation mécanique avant de pouvoir reprendre sa forme initiale par chauffage (figure I.31). Jusqu'à ces dernières années, la miniaturisation était difficile car ce modèle d'actionneur était intégré par assemblage dans les microsystèmes. Des matériaux AMF peuvent désormais être déposés par micro fabrication, ce qui facilite leur intégration. A titre d'exemple, des micro pinces sont fabriquées en utilisant des AMF (figure I.32) [17].

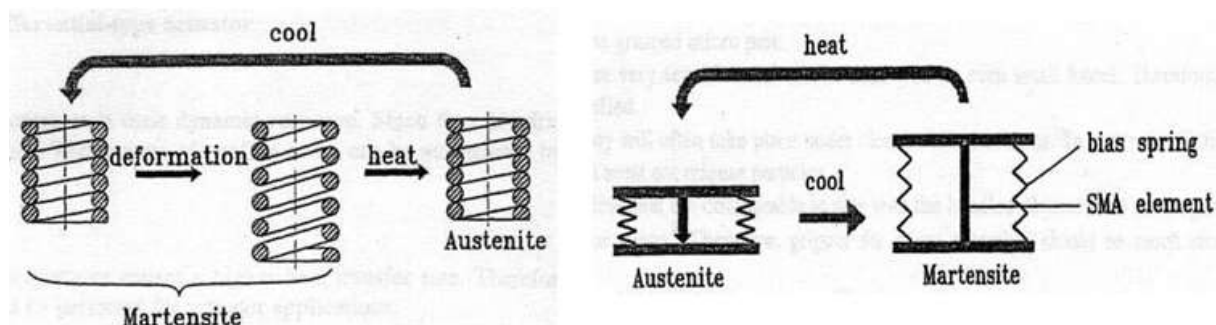


Figure I.32 : Mouvements et changement de phases d'un AMF [18].

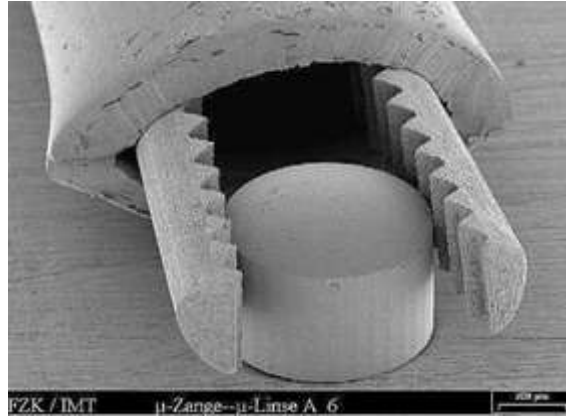


Figure I.33 : Micro-pince neurochirurgicale [13].

I.10.6 Actionnement électrothermique

L'actionnement électrothermique est largement utilisé dans le secteur des MEMS. Il présente un intérêt particulier pour les applications nécessitant des déplacements importants, car il permet de produire des forces significatives de l'ordre du "milli-newton". Ce principe repose sur la dilatation thermique des matériaux. Lorsqu'un matériau est chauffé et qu'il ne peut pas dissiper facilement la chaleur, les atomes de la couche sont excités, ce qui entraîne une expansion de la couche. Un matériau de volume " V "; soumis à une différence de température ΔT , apercevra son volume augmenter d'une quantité " $\alpha V \Delta T$ ", où α est le coefficient de dilatation thermique. L'actionnement électrothermique utilise le changement de volume pour produire des déplacements en utilisant une source de chaleur contrôlable [7].

Dans la plupart des cas, les fondateurs utiliseront l'une des quatre stratégies énumérées ci-dessous [23].

La première méthode comporte à joindre deux matériaux différents avec des coefficients de dilatation. Ce sont des actionneurs bimétalliques. Nous devons placer le matériau avec le coefficient de dilatation thermique le plus élevé en bas si nous voulons que la partie mécanique monte. Un actionneur à deux métaux, par exemple, pourrait être composé d'une couche supérieure de chrome et d'une couche inférieure de dioxyde de silicium. Lorsque l'ensemble est chauffé, la couche inférieure se caractérise par un changement volumétrique plus important que la couche supérieure, provoquant une flexion, c'est-à-dire que l'actionneur se plie pour compenser la différence. Le problème est que cette technologie nécessite des procédures de production sophistiquées en raison de la possibilité de séparation des deux matériaux [23].

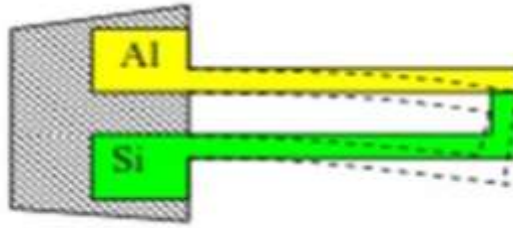


Figure I.34 : Principe d'actionnement thermique se déformant dans le plan par une différence de matériau des deux bras [1].

L'actionneur thermique traditionnel est le deuxième système. Contrairement au premier, un seul matériau est utilisé, ce qui entraîne un seul coefficient de dilatation thermique, bien que de nombreux composants soient produits. Le même matériau est vu dans le plan opposé, mais avec deux branches plus fines. La jambe fine chauffera plus rapidement, pliant l'actionneur.

De ce fait, il fonctionne sur le même principe qu'un actionneur bimétallique, mais avec moins de limitations technologiques.

La structure des nouveaux micro-actionneurs thermiques classiques a été considérablement modifiée. Ils comprennent un bras épais qui n'est pas traversé par le courant électrique et deux bras minces. L'avantage de cette construction est qu'elle permet des mouvements plus importants tout en dépensant moins d'énergie. Les actionneurs thermiques bimétalliques et traditionnels offrent plusieurs avantages, notamment la capacité de générer des déformations de plusieurs dizaines de micromètres avec une puissance inférieure à 50 mW. Les actionneurs électrostatiques ont des mouvements relativement limités, souvent inférieurs à 10 μm . Les températures obtenues lors du mouvement de l'actionneur thermique peuvent dépasser 800°C dans des circonstances sévères [15,23].

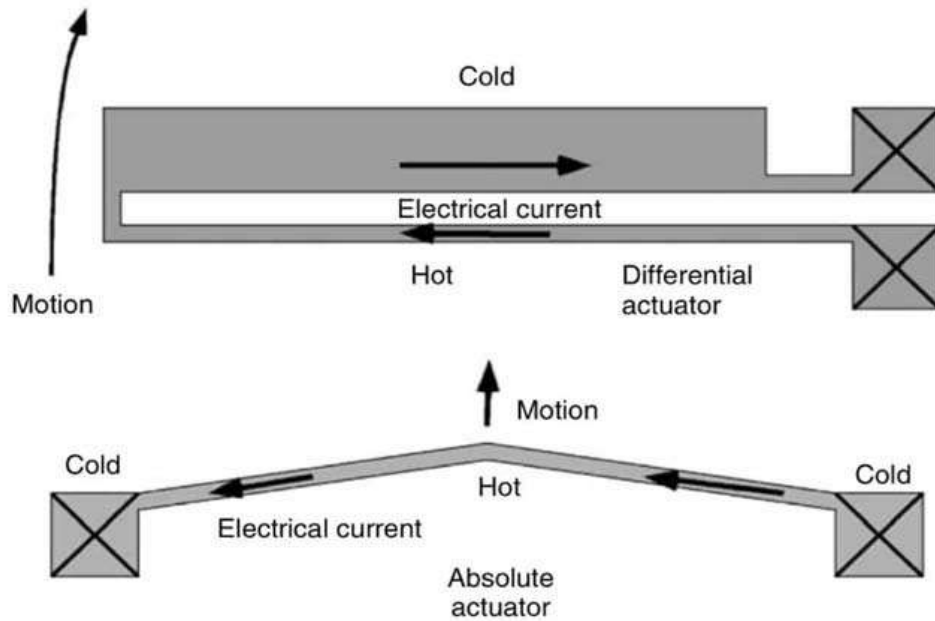


Figure I.35 : Schémas des actionneurs thermiques absolus et différentiels [1].

La méthode du faisceau courbe est la troisième technique. Ce principe implique d'installer une structure en forme de "V" (la poutre) entre deux points d'ancrage en contact avec le substrat. Les extrémités de cette structure sont en contact avec le substrat, ce qui les refroidit et les maintient à une température inférieure à celle du milieu de la poutre. L'un des points de contact recevra l'électricité et traversera la poutre courbée jusqu'à l'autre. La température de la structure augmentera, ce qui déplacera l'actionneur vers la pointe du "V". Par conséquent, la courbure permet de diriger le mouvement du déplacement dans la direction désirée [1,23].

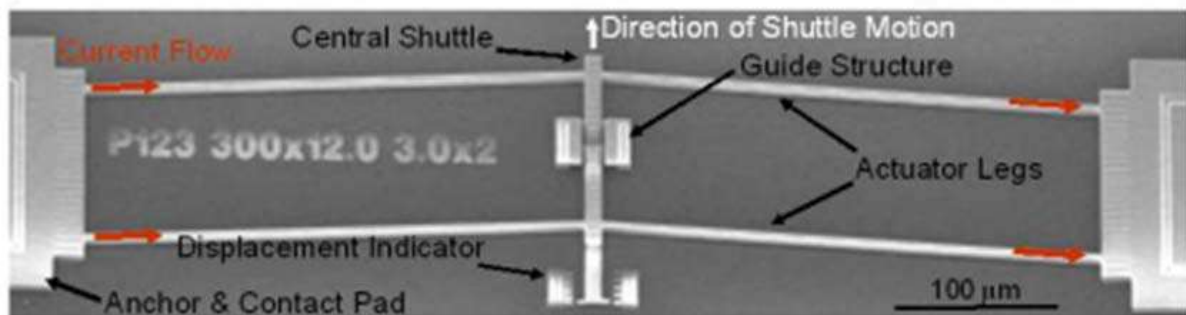


Figure I.36 : Micro actionneur thermique à poutres courbées entraînées électriquement (sous le microscope) [1].

Le micro-actionneur thermomécanique en plan, ou TIM, est la quatrième option. Il fonctionne sur les mêmes principes que la poutre courbe. Une poutre centrale est reliée à des minces branches incurvées légèrement incurvées qui sont fixées à un point d'ancrage. Lorsque le courant traverse les branches, l'élévation de température les fait bouger et déplace ainsi le faisceau. Cette approche a l'avantage d'offrir plus de souplesse. Les efforts mis en jeu peuvent

être modifiés pour augmenter ou réduire le déplacement de la poutre centrale en modifiant le nombre de branches [23].

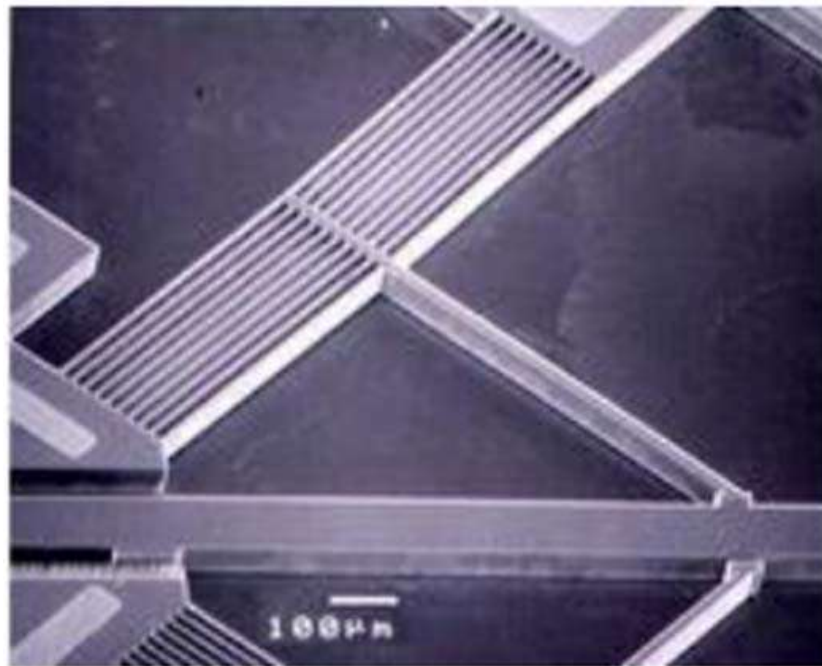


Figure I.37 : *Micro-actionneur thermomécanique* [1].

Il existe deux types d'actionneurs thermiques à déplacement dans le plan et hors plan pour l'actionnement électrostatique.

I.10.6.a Déplacement dans le plan

Plusieurs procédés existent parmi les dispositifs qui fonctionnent dans le plan. La majorité reposent sur la création d'un gradient de température après le passage d'un courant. En effet, une modification géométrique de la structure (figure I.37.b) ou une modification de la résistivité du matériau entraîne un gradient de température en raison d'une variation de la résistance électrique. Le déplacement latéral provoqué par la différence de dilatation thermique entre le bord « chaud » et le bord « froid » est le résultat de ce gradient. Certains mécanismes utilisent une forme géométrique spécifique, fréquemment en forme de "V", pour amplifier la déformation produite par la dilatation thermique plutôt que de changer la valeur de la résistance électrique (figure I.37.a) [2,11].

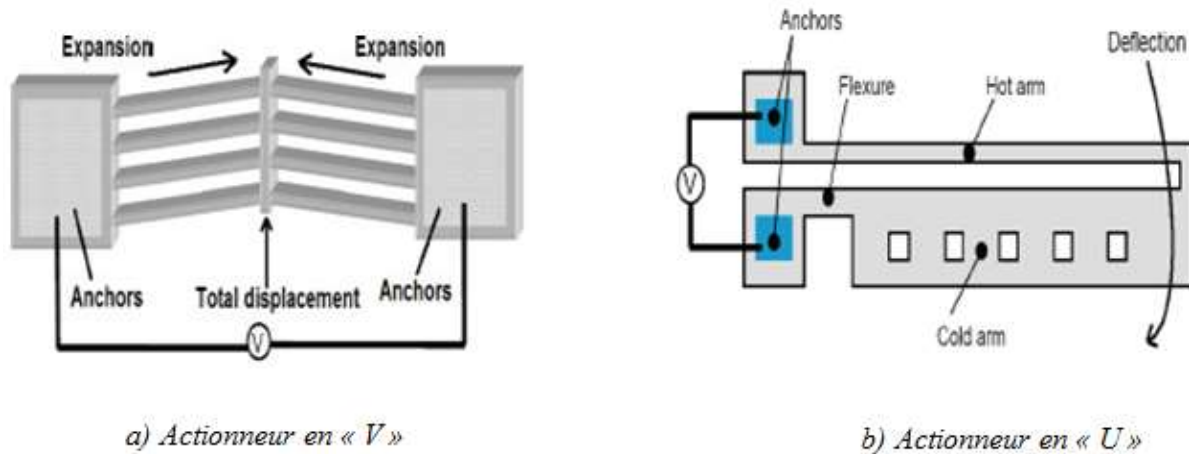


Figure I.38 : Différents actionnements thermiques dans le plan [1].

I.10.6.b Déplacement hors plan

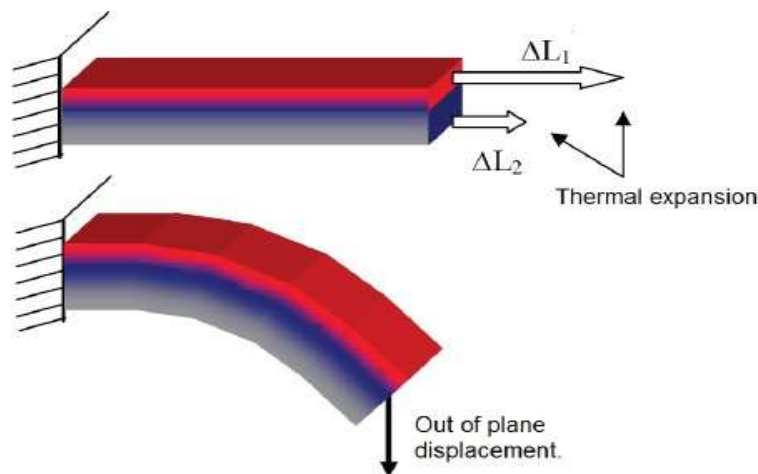


Figure I.39 : Principe d'un actionneur thermique bilame [1].

Le cantilever composé de différentes couches de coefficients de dilatation thermique (CDT) est la structure la plus fréquemment utilisée dans ce contexte. La différence entre les "CDT" provoque un déplacement vertical proportionnel à l'énergie thermique appliquée lorsque les matériaux du cantilever sont chauffés. Par exemple, pour un bilame (figure I.38), ΔL_1 et ΔL_2 augmenteront respectivement leur longueur. Cependant, ces allongements deviennent un gradient de contraintes en raison de la relation de continuité à l'interface des couches. Une charge "F" appliquée à l'extrémité de la poutre peut être utilisée pour résumer ce gradient [2,11].

Les actionneurs électrothermiques connaissent une expansion significative dans la conception de microsystèmes utilisés dans le domaine des télécommunications. En effet, environ 80% des

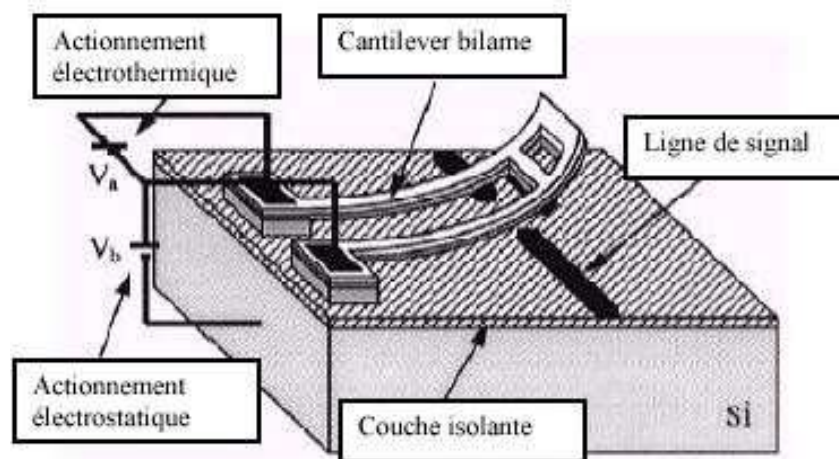


Figure I.40 : Actionneur électrothermique avec un déplacement hors plan d'un micro-relais [1].

micro-relais ou micro-commutateurs utilisent des actionneurs électrothermiques [1].

I.11 Fiabilité d'un micro actionneur

Plusieurs critères sont établis pour évaluer la fiabilité d'un type d'actionneur. Les principaux critères pour choisir un actionneur sont [17] :

- Précision : Il s'agit de la fidélité avec laquelle la valeur de sortie est aboutie.
- Répétabilité : capacité à reproduire fidèlement la sortie ("position ou force") à nombreuse reprises pour une même excitation.
- Course : écart entre la valeur minimale et maximale que la sortie peut aboutir.
- Temps de réponse : il est généralement défini comme le temps nécessaire à la sortie pour gagner un certain pourcentage de la valeur correspondant à un changement d'entrée.
- Force développée : il s'agit de la force que l'actionneur peut générer.
- Rendement : rapport entre la quantité d'énergie mécanique utile produite et la quantité d'énergie fournie.
- Effet d'échelle : il désigne l'amélioration ou la détérioration des performances en raison de la réduction de la géométrie.
- Réalisabilité : facilité de fabrication de l'actionneur à l'aide de techniques de fabrication maîtrisées et reproductibles.
- Intégrabilité : possibilité d'intégrer l'actionneur dans un MEMS par micro fabrication.

I.12 Matériaux pour la fabrication des MEMS

I.12.1 Le Silicium (Polysilicium)

Les circuits intégrés électroniques les plus courants sont fabriqués à partir de silicium. Le silicium est un matériau intéressant pour une gamme d'applications MEMS en raison de ses économies d'échelle, de sa disponibilité à bas coût et de son aptitude à incorporer des fonctionnalités électroniques. Les propriétés matérielles du silicium lui confèrent également de nombreux avantages. Le silicium est un matériau de Hooke presque parfait sous la forme de monocristaux, par conséquent, pratiquement aucune dissipation d'énergie lorsqu'il est fléchi. De plus, ce mouvement est répétable, ce qui rend le silicium très crédible car il souffre très peu de fatigue et peut durer plusieurs milliards de cycles sans rupture [1,9].



Figure I.41 : Tige du silicium [1].

I.12.2 Polymères

Le silicium cristallin reste un matériau complexe et quelque peu coûteux à produire, malgré le fait que le secteur de l'électronique offre des économies d'échelle pour l'activité du silicium. Cependant, les polymères peuvent être produits en grande quantité et ont une variété de propriétés matérielles. Les dispositifs MEMS sont idéaux pour les applications de micro-traitement car ils peuvent être réalisés à partir de polymères à l'aide de procédures telles que le moulage par injection, le gaufrage, la stéréolithographie [24].

I.12.3 Céramiques

Les objets en céramique sont fabriqués soit par solidification d'une pâte plastique humide à haute température, soit par agglutination par chauffage d'une poudre sèche compactée sans le passage par une phase liquide. Une céramique est solide à température normale et n'est ni

métallique ni biologique. Par conséquent, le terme « céramique » fait référence aux objets eux-mêmes [38]. Il s'agit d'oxydes, de carbures, de nitrures et d'autres substances.

En raison de sa dureté inhérente, de son inertie chimique, de sa stabilité à haute température et de son isolation électrique et thermique, l'oxyde d'aluminium est un matériau céramique fascinant. Pour des applications à fortes contraintes dans les domaines mécanique, aéronautique et médical, son utilisation comme revêtement sur des pièces métalliques permet d'ajouter des qualités utiles [26].

I.12.4 Métal

Les composants MEMS peuvent également être réalisés à partir de métaux. Bien que les métaux ne possèdent pas tous les qualités mécaniques du silicium. Les métaux peuvent être appliqués par galvanoplastie, pulvérisation sous vide. Les métaux les plus généralement utilisés sont l'or, le nickel, l'aluminium, le cuivre, le chrome, le titane, le tungstène... [23].

I.13 Considérations sur les Avantages et les inconvénients des microsystemes

Les microsystemes peuvent être utilisés dans une variété de domaines. Cependant, ils ne seront utiles que dans les domaines où leurs propriétés présentent des avantages réels, tels que :

La miniaturisation :

Les dimensions micro impliquent des avantages en termes de :

Encombrement, sensibilité, fiabilité mécanique, capacité à multiplier le nombre d'éléments pour des mesures distribuées, consommation

La fabrication sérielle :

- La possibilité de fabriquer de grandes quantités
- La possibilité d'améliorer les performances.

La connexion aux circuits intégrés :

- La possibilité d'ajouter des activités de traitement du signal et de commande d'actionneur aux capteurs intelligents (capteurs intelligents).
- Améliorer la sensibilité de certains capteurs en réduisant les erreurs.

I.14 Les avantages du Silicium

En raison des qualités qui suivent, le silicium est le matériau préféré en technologie des microsystemes. L'historique de son utilisation est lié à la micro-électronique. En plus de la semi-

conductivité étudiée en micro-électronique, il possède des propriétés mécaniques, physiques et chimiques très fascinantes, parmi lesquelles on peut citer :

- une grande pureté (99,9999999 %)
- micro-usinage facile
- une piézorésistivité très importante
- semi-Conducteur
- excellentes propriétés électriques
- excellentes propriétés mécaniques
- très répandu (fabrication de CI).

Tableau I-1 : Propriétés Physiques du Polysilicium.

Matériau	E (GPa)	ν	α (°K ⁻¹)	ϖ (Ωm)	K_L (W.m ⁻¹ °K ⁻¹)
Poly-silicium	169	0.22	2.9x10 ⁻⁶	0.23	50

I.15 Problématique

L'utilisation croissante du Silicium ou du Poly Silicium, dans l'industrie des semi-conducteurs, plus globalement dans la fabrication des capteurs et des MEMS, a entraîné l'épuisement de ce matériau par la diminution de son exploitation et de là l'augmentation de son coût.

A titre indicatif, selon l'association professionnelle SEMI (Semiconductor Equipment and Materials International), l'utilisation mondiale de plaquettes de silicium au deuxième trimestre 2020 a représenté 2,034 millions de m² alors qu'au 1^{er} trimestre de la même année 1,884 million de m², soit une hausse de 8%. Elle a été supérieure de 6% à celle du 2^{ème} trimestre 2019, avec ses 1,925 million de m².

De plus les experts du marché mondial des capteurs et des MEMS déclarent qu'une grande pénurie de production a été observée au début de l'année 2022, ce qui était influençable dans le domaine de l'automobile et de l'électronique.

Cela a poussé les scientifiques à découvrir de nouveaux composés avec des caractéristiques physiques similaires au poly silicium.

I.16 Bibliographies

- [1] Larabi, Z., Modélisation 3D d'un dispositif MEMS : Application à une pompe sanguine, (2013).
- [2] Abouchi, N., Contribution à une plate forme d'aide à la conception de Microsystème, Theses.fr (2009).
- [3] Achkar, H., Modélisation et conception des micro commutateurs RF MEMS à actionnement électrostatique et/ou piezoélectrique, (2009).
- [4] Bensaidane, Hakim. Modélisation de systèmes micro-électromécaniques (MEMS) en régime dynamique par la méthode des éléments finis. Diss. Tizi-ouzou, (2006).
- [5] Charlot, B., Mir, S., Parrain, F., et Courtois, B., Generation of electrically induced stimuli for MEMS self-test, *Journal Of Electronic Testing* **17** (2006) 459-470.
- [6] Cherif, B., Des puces à protéines/peptides pour des applications en recherche fondamentale et clinique, (2006).
- [7] Kaou, N., Jeannot, J. C., et De Labachellerie, M., New method for reduction of corner undercutting in anisotropic KOH etching, and applications to MEMS and MOEMS, *Proceedings Of SPIE, The International Society For Optical Engineering/Proceedings Of SPIE* **3680** (1999) 1091.
- [8] Juneidi, Z., Torki, K., Charlot, B., et Courtois, B., MEMS synthesis and optimization, *Proceedings Of SPIE, The International Society For Optical Engineering/Proceedings Of SPIE* **4408** (2001) 159-164.
- [9] Lambert, P., Valentini, A., Lagrange, B., De Lit, P., et Delchambre, A., Design and performances of a one-degree-of-freedom guided nano-actuator, *Robotics And Computer-Integrated Manufacturing* **19** (2003) 89-98.
- [10] Ferreira, A., et Minotti, P., Motion Coordination and Hybrid Position/Force Control of a Mobile Micromanipulator Actuated by Direct-Drive Vibromechanisms, dans *Courses and Lectures*, (2000), p. 169-178.
- [11] Muratet, S., Conception, caractérisation et modélisation : fiabilité prédictive de MEMS à actionnement électrothermique, (2005).
- [12] Conseil, François., Simulation, conception et réalisation d'un commutateur en technologie microsystème pour dispositifs logiques sécuritaires| Theses. fr. Diss. Lille 1, (2004).
- [13] Xinli, N. W., Shumei, N. C., et Shukang, N. C., Advantages of electrostatic micromotor and its application to medical instruments, *Conference Record Of The 2002 IEEE Industry Applications Conference. 37th IAS Annual Meeting (Cat. No.02CH37344)* (2003).
- [14] Arai, F., Andou, D., Nonoda, Y., Fukuda, T., Iwata, H., et Itoigawa, K., Integrated microendeffector for micromanipulation, *IEEE/ASME Transactions On Mechatronics* **3** (1998) 17-23.
- [15] Mouloud, H., et Hafid, O. S., Modélisation par éléments finis d'un système d'actionnement magnétothermique, (2015).
- [16] Zhang, N. D., Breguet, J.-M., Clavel, R., Sivakov, V., Christiansen, S., et Michler, J., In Situ Electron Microscopy Mechanical Testing of Silicon Nanowires Using Electrostatically Actuated Tensile Stages, *Journal Of Microelectromechanical Systems* **19** (2010) 663-674.
- [17] Delinchant, B., Rakotoarison, H. L., Ardon, V., Chadebec, O., et Cugat, O., Gradient based optimization of semi-numerical models with symbolic sensitivity : Application to

- a simple ferromagnetic MEMS switch device, *International Journal Of Applied Electromagnetics And Mechanics* **30** (2009) 189-200.
- [18] Hocine, Haouès. "Etude d'un microlevier à Actionnement Electromagnétique. Magister thesis (2013), Université de Batna 2." (2017).
- [19] Ahboub, Dihem. Etude d'un micro-actionneur electromagnetique a aimants permanents. Diss. Batna, (2012).
- [20] Nadim, Maluf, and Williams Kirt., *An introduction to Microelectromechanical Systems Engineering*, Artech House., Inc., US (2004).
- [21] Beeby, Stephen, et al., *MEMS mechanical sensors*. Artech House., Inc. Boston, London (2004), 104-105.
- [22] Reza Ghodssi, Pinyen Lin, *"MEMS Materials and Processes Handbook*, Springer Science (2011) ".
- [23] Banks, D., *Microengineering, MEMS, and Interfacing*, (2006).
- [24] Gemelli, A., Tambussi, M., Fusetto, S., Aprile, A., Moisello, E., Bonizzoni, E., et al., Recent Trends in Structures and Interfaces of MEMS Transducers for Audio Applications : A Review, *Micromachines* **14** (2023) 847.
- [25] Ando, B., Baglio, S., L'Episcopo, G., et Trigona, C., Investigation on Mechanically Bistable MEMS Devices for Energy Harvesting From Vibrations, *Journal Of Microelectromechanical Systems* **21** (2012) 779-790.
- [26] Santos, Hector. *Principles and Applications of NanoMEMS Physics*. Vol. 15. Springer Science & Business Media, (2006).
- [27] Allen, J. J., *Micro Electro Mechanical System Design*, (2005).
- [28] Glynne-Jones, P., Tudor, M. J., Beeby, S. P., et White, N. M., An electromagnetic, vibration-powered generator for intelligent sensor systems, *Sensors And Actuators A Physical* **110** (2003) 344-349.
- [29] Erturk, A., et Inman, D. J., An experimentally validated bimorph cantilever model for piezoelectric energy harvesting from base excitations, *Smart Materials And Structures* **18** (2009) 025009.
- [30] Beeby, S. P., Tudor, M. J., et White, N. M., Energy harvesting vibration sources for microsystems applications, *Measurement Science And Technology* **17** (2006) R175-R195.

Chapitre II : Les alliages Heusler

II.1 Introduction

En 1903, "Fritz Heusler" a fait une découverte surprenante : un alliage composé de cuivre, de manganèse et d'aluminium (Cu_2MnAl) se comporte comme un matériau ferromagnétique, malgré le fait que ses constituants individuels ne le soient pas [1,2].

Cette catégorie de matériaux exceptionnels englobe désormais une collection étendue de plus de 1000 composés, connus sous le nom de composés ou alliages Heusler.

Les alliages Heusler sont groupés en deux familles en fonction de leur composition chimique. La première famille, appelée Full-Heusler, est composée d'alliages ayant une formule chimique de type X_2YZ . Dans cette formule, X représente souvent un métal de transition, Y est généralement Mn ou Fe, et Z est souvent un semi-conducteur ou Al. La stœchiométrie de ces alliages est de type 2:1:1.

La deuxième famille, connue sous le nom de Half-Heusler, est constituée de matériaux ternaires semi-conducteurs ou métalliques avec une stœchiométrie de type 1:1:1. Les alliages de cette famille ont une composition de type XYZ

La structure cristalline des alliages Heusler est cubique. Dans le cas des Full-Heusler, elle est composée de quatre mailles cubiques à faces centrées, comprenant deux mailles d'atomes X, une maille d'atomes Y et une maille d'atomes Z [1,3].

Tableau II-1 : Principales combinaisons des alliages Heusler [1,17].

The image shows a standard periodic table with various color-coding. At the top center, there is a legend for 'Heusler X, Y, Z' with three colored boxes: red for X, blue for Y, and green for Z. The periodic table itself includes element symbols, names, and atomic numbers. At the bottom left, there is a legend for 'Z' (atomic number), 'Symbol', and 'Name'. The table is organized into groups labeled with Roman numerals (IA, IIA, IIIA, IVB, VB, VIB, VIIB, VIIIB, VIII, IX, X, XI, XII, IIIB, IVB, VB, VIB, VIIA, VIIIA).

Les alliages Heusler se positionnent comme des concurrents de choix pour les applications technologiques dans le domaine de la spintronique, notamment en raison de leur température de Curie élevée [7]. Parmi ces attentions, on peut citer les jonctions tunnel magnétiques (TMR) [8]. Plus de 250 combinaisons possibles de ces alliages sont considérées comme de nouveaux matériaux semi-conducteurs pour les domaines d'énergies, offrant une plage de bande interdite (gap) variant de 0 eV à 4 eV en fonction de leur composition chimique. Ces matériaux présentent de bonnes propriétés pour les applications des cellules photovoltaïques, ainsi que pour des applications thermoélectriques, comme dans le cas du "TiNiSn" [1,9].

II.2.1 Alliages Semi-Heusler (Half-Heusler)

En règle générale, l'élément ayant le plus de propriétés électropositives est situé au commencement de la formule. Il peut être un élément des terres rares, un métal de transition ou un élément d'un groupe principal [1,11].

Tableau II-2 : Principales combinaisons des alliages Half Heusler (Semi-Heusler) [10,11].

H																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

Là aussi, le schéma des couleurs montre la combinaison des différents éléments pour la création d'une large catégorie des composés Semi-Heusler.

II.2.2 Les alliages Heusler (Full-Heusler)

Les composés Heusler, comme il a été mentionné auparavant, ont généralement la combinaison " X_2YZ ", avec " X " et " Y " des métaux de transition et " Z " un élément du tableau périodique du groupe III, IV ou V. L'élément " Y " peut être un métal alcalinoterreux ou des terres rares dans des cas exceptionnels. Le plus souvent, l'atome doublé " X " est au début de la composition et l'atome " Z " du groupe III, IV ou V est à la fin [1,12].

II.3 Structure cristalline des alliages Heusler

Les alliages " XYZ " ou semi-Heusler cristallisent dans une structure cubique non centro symétrique appelée structure C_{1b} , provenant d'une structure tétraédrique de type " ZnS " par le remplissage des sites octaédriques du réseau (figure II.1). L'interpénétration de trois sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes " X ", " Y " et " Z " [13], selon les positions de Wyckoff suivantes : 4a (0,0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2) et 4c (1/4, 1/4, 1/4). Ces positions caractérisent ce type de structure.

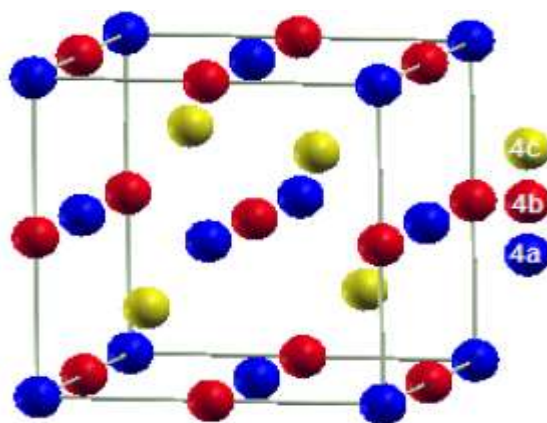


Figure II.1 : La structure Semi-Heusler C_{1b} [1].

Tableau II-3 : Occupation des sites non équivalents dans la structure semi-Heusler C_{1b} [1].

	X	Y	Z
1 ^{er} arrangement	4a	4b	4c
2 ^{ème} arrangement	4b	4c	4a
3 ^{ème} arrangement	4c	4a	4b

Les possibilités d'arrangements atomiques non équivalents pour la structure $C1_b$ sont présentées dans le tableau II.3.

Le premier et le deuxième arrangement sont généralement les plus utilisés. La structure $C1_b$ est décrite dans un modèle $MgAgAs$, où les éléments "Y" et "Z" forment un sous réseau covalent de type "ZnS" et "X" et "Y" forment une maille de type chlorure de sodium [14]. En fait, la plupart des composés semi-Heusler ont une configuration atomique similaire à celle du composé $MgCuSb$ [14, 15]. Les éléments "Y" et "Z" forment un sous réseau covalent de type "ZnS", tandis que "X" (qui est électropositif) et "Y" (qui est électronégatif) forment une maille de type NaCl.

Les arrangements atomiques mentionnés précédemment résultent principalement de deux facteurs : la différence de taille entre les atomes et le type d'interactions interatomiques. La formation d'une liaison covalente est généralement influencée par la nature chimique des éléments ; certains éléments tels que Mg, Ag, Al, ont une tendance à former ce type de liaison avec une maille de type ZnS, comme observé dans le cas de $LiMgSb$ [16].

La famille suivante des alliages Heusler est connue sous le nom de formule X_2YZ et possède une stœchiométrie de 2:1:1. Elle est communément appelée "Full-Heusler". Ces alliages cristallisent avec un prototype fréquemment mentionné, le Cu_2MnAl (L_{21}), dans le groupe d'espace cubique $Fm-3m$ ("groupe d'espace N° 225"). Les atomes "Y" occupent les positions 4a (0, 0, 0) et 4b (1/2, 1/2, 1/2). Deux des quatre sous-réseaux à structure cubique à faces centrées (cfc) de la structure L_{21} sont occupés par l'atome "X".

Dans cette configuration, les sites octaédriques sont occupés par les atomes "Y" (moins électropositifs) et "Z" (plus électropositifs), formant ainsi une structure de type NaCl. Les sites tétraédriques sont quant à eux réservés aux atomes "X", formant une structure également de type NaCl (figure II-2) [19].

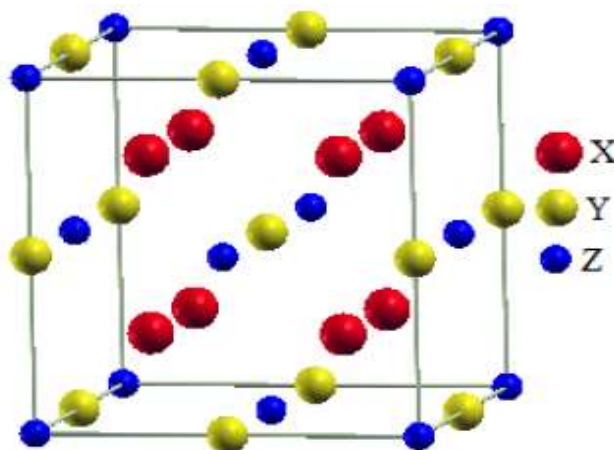


Figure II.2 : La structure Full-Heusler L21 [1, 16].

En plus de la structure mentionnée précédemment, une structure Heusler inversée est observée lorsque le numéro atomique de "Y" est supérieur à celui de "X" dans la même période " ($Z(Y) > Z(X)$)", bien que cela puisse également se produire avec des composés contenant des métaux de transition de différentes périodes [21]. Dans tous les cas, l'élément "X" est plus électropositif que l'élément "Y". Ainsi, les éléments "X" et "Z" forment une structure de type sel de mer qui permet de réaliser une coordination octaédrique pour "X". Les sites tétraédriques présentant une symétrie d'ordre 4 sont occupés par les atomes restants "X" et "Y". Bien que quatre sous-réseaux à structure cubique à faces centrées interagissent, les atomes X ne forment pas un simple réseau cubique. Au lieu de cela, ils sont positionnés aux sites 4a (0,0,0) et 4d ($3/4, 3/4, 3/4$), alors que les atomes "Y" et "Z" se trouvent aux sites 4b ($1/2, 1/2, 1/2$) et 4c ($1/4, 1/4, 1/4$). La formule (XY)X'Z peut également être utilisée pour différencier ces alliages Heusler inversés des alliages Heusler normaux. La structure Heusler inversée est habituellement observée dans les matériaux à base de "Mn₂", où " $Z(Y) > Z(Mn)$ ", comme montré dans la figure II-3. Un exemple approfondi est le "Mn₂CoSn" ou "(MnCo)MnSn" [22,23].

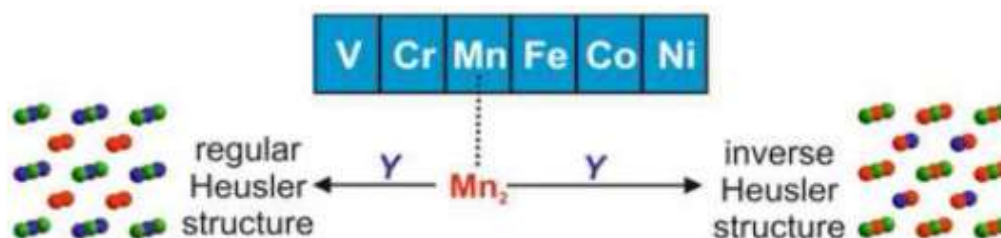


Figure II.3 : Les structures (régulière et inverse) des alliages Heusler à base de Mn₂ dépendant de la position de l'élément Y [20].

La structure tétragonale avec le groupe $I4/mmm$ (groupe d'espace N° 139), communément appelée $D0_{22}$, peut être considérée comme une nouvelle structure préférée. En réalité, la structure $D0_{22}$ est dérivée de la structure L_{21} par une déformation d'environ 27 % selon l'axe c . Cependant, cette déformation n'est pas constante et le rapport " c/a " dépend des éléments chimiques constituant l'alliage [1,24].

Les éléments "X", "Y" et "Z" occupent respectivement les positions 4d (0, 1/2, 1/4), 2b (0, 0, 1/2) et 2a (0, 0, 0) dans cette structure tétragonale (figure II-4).

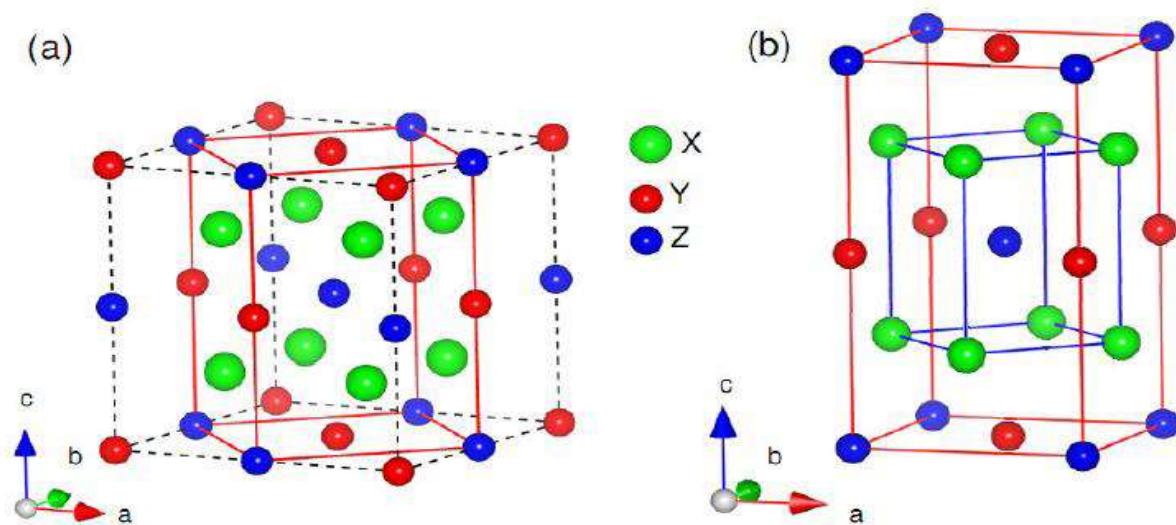


Figure II.4 : Composés Heusler X_2YZ , (a) Structure L_{21} , (b) Structure $D0_{22}$ [20].

La structure hexagonale $D0_{19}$, une autre structure rarement observée, est provenue de la structure de type Ni_3Sn avec le groupe $P6_3/mmc$ (groupe d'espace N° 194) [25]. Cette structure peut être obtenue en modifiant la formule générale X_3Z en remplaçant un atome X par un atome Y.

II.4 Effets thermoélectriques

La discipline qui étudie les interactions entre la chaleur et l'électricité est connue sous le nom de « thermoélectricité ». Les effets thermoélectriques ont été découverts au début du XIXe siècle. Cependant, l'utilisation des matériaux thermoélectriques n'a commencé à s'accroître qu'à la fin du XXe siècle, principalement en raison de leur faible efficacité.

II.4.1 L'effet Seebeck

L'effet Seebeck est un phénomène qui se produit lorsque les jonctions de différents matériaux conducteurs sont soumises à une différence de température, ce qui entraîne l'apparition d'une

tension. La magnitude de cette tension dépend à la fois des différences de température et des caractéristiques des matériaux utilisés.

Son expérience est simple : lorsque deux matériaux conducteurs de natures distinctes, "a" et "b", sont reliés par deux jonctions situées aux points "X" et "W", l'effet Seebeck se produit. Cela crée une différence de température "dT" entre les points "W" et "X", ce qui emmène à une différence de potentiel "dV" entre les points "Y" et "Z" (figure II-5).

De cette expérience, un coefficient s'en résulte, c'est le coefficient Seebeck ou pouvoir thermoélectrique (en $V.K^{-1}$), il est défini par la loi [35] :

$$S_{ab} = \frac{dV}{dT} = \frac{V_Y - V_Z}{T_W - T_X}$$

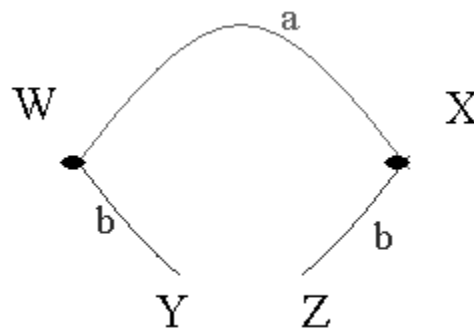


Figure II.5 : Effet Seebeck [26].

II.4.2 L'effet Peltier

La présence d'un gradient de potentiel génère à la fois un flux de chaleur et un flux de charge. Ainsi, un matériau thermoélectrique a la capacité de produire du froid ou de la chaleur en utilisant un courant électrique [26].

Considérons la jonction illustrée dans la figure II.6, qui connecte deux semi-conducteurs dopés de type n et p. Si le courant passe du semi-conducteur n vers le p, la jonction subit un refroidissement. À l'inverse, si le sens du courant est inversé, la jonction se réchauffe. La quantité de chaleur absorbée ou libérée, notée Q , est directement relative au courant injecté, I [27].

$$\vec{Q} = \Pi_{np} \vec{J} \quad (II-1)$$

$\vec{Q}$: Flux de chaleur surfacique

Π : Coefficient Peltier

$\vec{J}$: Flux de charges

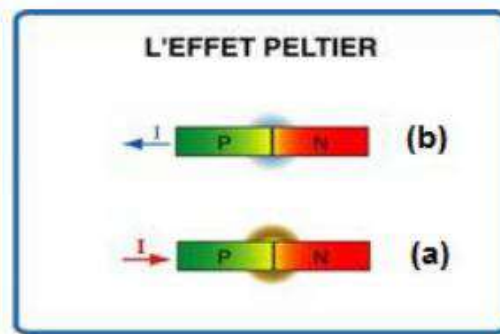


Figure II.6 : Effet Peltier, selon le sens du courant I

(a) absorption de la chaleur ; (b) dégagement de la chaleur [26].

II.4.3 L'effet Thomson

La variation du coefficient "Seebeck" en fonction de la température donne lieu à l'effet "Thomson". Lorsqu'un conducteur est soumis à un gradient de température et parcouru par une densité de courant, il se produit une création ou une absorption de chaleur, similaire à l'effet Peltier". L'effet "Thomson" est un symptôme continue de l'effet "Peltier", mais avec une génération de chaleur distincte de celle créée par l'effet "Joule". La quantité de chaleur émise ou absorbée par unité de temps et de volume est proportionnelle au produit scalaire du gradient de température et de la densité de courant :

$$Q_T = \tau' J \Delta T \quad (\text{II-2})$$

Où τ' signifie le coefficient de "Thomson".

"Lord Kelvin" a montré que les coefficients "Seebeck, Peltier et Thomson" sont liés :

$$\begin{aligned} \Pi &= S.T \\ \tau' &= T \cdot \frac{dS}{dT} \end{aligned} \quad (\text{II-3})$$

Cette relation démontre que l'effet "Thomson" sera moins important et que le coefficient "Seebeck" sera moins dépendant de la température.

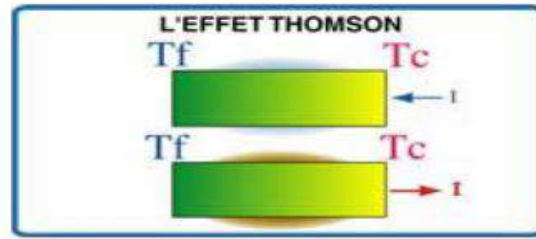


Figure II.7 : Effet Thomson ; T_f -température froide ; T_c -température chaude [26].

II.4.4 L'effet Joule

La quantité de chaleur générée par le passage d'un courant électrique à travers un matériau est directement proportionnelle au carré de l'intensité du courant. Cet effet est attribué à la résistance du matériau au mouvement des électrons qui génèrent le courant électrique. À l'exception des super conducteurs, tous les matériaux produisent de l'effet Joule lorsqu'un courant électrique les traverse. La relation suivante décrit la production de chaleur par l'effet "Joule" :

$$Q_{\text{joule}} = RI^2 \quad (\text{II-4})$$

Où R est la résistance électrique du matériau.

II.5 Les variables thermoélectriques

La température, la concentration des porteurs de charge et le potentiel chimique sont les variables thermoélectriques.

II.5.1 Potentiel chimique

Le potentiel chimique d'un constituant "i", noté " μ_i ", est défini comme la grandeur molaire de l'enthalpie libre G [26]. Cela signifie que le potentiel chimique représente la dérivée partielle de G par rapport à la quantité de matière n_i du constituant "i", à une température T et une pression P avec une quantité de matière du constituant j , différent de i , maintenue constante :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_{j \neq i}} \quad (\text{II-5})$$

Le potentiel chimique est défini aussi :

$$\mu_i = g_i = h_i - T.s_i \quad (\text{II-6})$$

Où g_i , h_i , s_i sont l'enthalpie libre, l'enthalpie et l'entropie molaire respectivement

avec :

$$h_i = \left(\frac{\partial H}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_{j \neq n_i}} \quad (\text{II-7})$$

$$s_i = \left(\frac{\partial S}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_{j \neq n_i}} \quad (\text{II-8})$$

II.6 Coefficients thermoélectriques

II.6.1 Conductivité électrique

La mobilité de conduction μ_e est la proportionnalité qui relie la vitesse de dérive des électrons v_e au champ électrique appliqué $\vec{E}$ [26].

$$v_e = \frac{q\tau}{m_e} \vec{E} \quad (\text{II-9})$$

μ_e - Mobilité de l'électron

q - Charge de l'électron

τ - Temps de relaxation.

La densité de courant J_e :

$$J_e = qn_e \vec{v}_e = \frac{q^2 n_e \tau}{m_e} \vec{E} = \sigma \vec{E} \quad (\text{II-10})$$

n_e - concentration électronique,

$\frac{q^2 n_e \tau}{m_e}$ - facteur de proportionnalité ou conductivité électrique σ .

II.6.2 Conductivité thermique

Deux facteurs contribuent principalement à la conductivité thermique [26, 27] :

$$k = k_e + k_l \quad (\text{II-11})$$

Où k_e est la conductivité thermique électronique attribuée aux porteurs de charge électroniques et k_l attribuée aux vibrations thermiques du réseau, connue sous le nom de contribution des phonons.

La loi de "Wiedemann-Franz" relie la conductivité électrique à la conductivité thermique électronique :

$$k_e = LT\sigma \quad (\text{II-12})$$

L : Nombre de Lorentz.

Ce nombre est calculé pour un gaz d'électrons libres :

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2,44.10^{-8} \text{ en } V^2 K^{-1} \quad (\text{II-13})$$

La conductivité thermique de réseau k_l , est principalement influencée par l'organisation structurale du matériau et elle est évaluée à partir de la relation :

$$k_l = \frac{k_B}{2\pi^2 v} \left(\frac{k_B}{\hbar} \right)^3 T^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{\tau^{-1}(e^x - 1)^2} dx \quad (\text{II-14})$$

$$\text{Où } x = \frac{\hbar \omega}{k_B T},$$

ω - pulsation des phonons,

k_B - constante de Boltzmann,

$\hbar$ - constante de Planck réduite,

θ_D - température de Debye,

v - vitesse du son

τ - temps de relaxation des phonons.

Cependant, l'expression précédente peut être rédigée de manière plus simple afin de souligner les caractéristiques clés agréant d'expliquer ses variations. Par conséquent, dans un cristal diélectrique parfait, si l'on suppose que la pulsation ω n'affecte pas la vitesse du son et le temps de relaxation, l'évolution de la chaleur spécifique à volume constant C_v , du libre parcours moyen des phonons l , et de la vitesse du son v détermine alors la conductivité thermique :

$$k_l = \frac{1}{3} C_v \cdot v \cdot l \quad (\text{II-15})$$

II.6.3 Le facteur de mérite

Les propriétés d'un matériau thermoélectrique sont évaluées à l'aide d'un paramètre sans dimension appelé facteur de mérite (ZT). Ce facteur quantifie la performance d'un matériau thermoélectrique pour une différence de température donnée, et il est évalué selon la relation suivante [26] :

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{k} T \quad (\text{II-16})$$

T - température absolue (K)

S - coefficient de Seebeck ($V \cdot K^{-1}$)

σ - conductivité électrique ($\Omega^{-1} m^{-1}$)

k - conductivité thermique ($W/m \cdot K$).

II.6.4 Le facteur de puissance

Le facteur de puissance (PF) est une mesure de la puissance utile, générée par un matériau thermoélectrique lorsqu'il est soumis à un effet thermique. Il permet de classer les modules thermoélectriques en fonction de leur capacité à fournir de la puissance électrique. Ainsi, le facteur de puissance (PF) est un paramètre thermoélectrique essentiel qui est exprimé par l'équation suivante :

$$PF = S^2 \sigma \quad (\text{II-17})$$

Remarque :

La recherche de nouveaux matériaux constitue l'intérêt primordial des scientifiques, que ce soit dans le but d'améliorer les conceptions existantes ou de remplacer des matériaux surutilisés et épuisés. Les méthodes les plus rentables pour évaluer les propriétés structurales, mécaniques, thermodynamiques, etc., consistent à élaborer le matériau et à appliquer des tests et essais normalisés, ce qui demande des ressources considérables en termes de moyens et de temps pour atteindre cet objectif. Les méthodes théoriques modernes, notamment la méthode DFT (Density Functional Theory), permettent de contribuer à cette compréhension en fournissant des simulations et des prédictions précises des propriétés des matériaux. Dans le prochain chapitre, nous présenterons une analyse approfondie de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT

- Density Functional Theory) et de la méthode ab-initio, en mettant en évidence leur application dans l'estimation des propriétés structurales, mécaniques, thermodynamiques, etc..., des matériaux. Grâce à leurs avantages et leur puissance significative, ces méthodes jouent un rôle crucial dans la progression de la recherche des composés et dans la compréhension approfondie de leurs propriétés. Nous aborderons également le logiciel Wien2k, créé par une équipe de recherche de l'Université de Vienne en Autriche, qui permet de calculer les structures électroniques en utilisant la méthode des ondes planes. Ce logiciel jouit d'une reconnaissance internationale en raison de sa précision et de sa fiabilité, et il reste largement utilisé par les scientifiques dans les axes de la recherche des matériaux.

II.7 Bibliographies

- [1] Abbassa, H., Hadjri-Mebarki, S., Amrani, B., Belaroussi, T., Khodja, K. D., et Aubert, P., Theoretical investigation of new Heusler alloys $\text{Ru}_2\text{VGa}_{1-x}\text{Al}_x$, *Journal Of Alloys And Compounds* **637** (2015) 557-563.
- [2] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, *Verh DPG* **5**, 220(1903).
- [3] F. Heusler, *Verh DPG* **5**, 219 (1903).
- [4] P.G. Van Engen, K.H. J. Bushow, R. Jongebreur, M. Erman, *Appl Phys Lett* **42**, 202 (1983).
- [5] Krenke, T., Duman, E., Acet, M., Wassermann, E. F., Moya, X., Mañosa, L., et al., Inverse magnetocaloric effect in ferromagnetic Ni–Mn–Sn alloys, *Nature Materials* **4** (2005) 450-454.
- [6] Kainuma, R., Imano, Y., Ito, W., Sutou, Y., Morito, H., Okamoto, S., et al., Magnetic-field-induced shape recovery by reverse phase transformation, *Nature* **439** (2006) 957-960.
- [7] Wurmehl, S., Fecher, G. H., Kandpal, H. C., Ksenofontov, V., Felser, C., et Lin, H.-J., Investigation of Co_2FeSi : The Heusler compound with highest Curie temperature and magnetic moment, *Applied Physics Letters* **88** (2006).
- [8] Wang, W., Liu, E., Kodzuka, M., Sukegawa, H., Wojcik, M., Jedryka, E., et al., Coherent tunneling and giant tunneling magnetoresistance in $\text{Co}_2\text{FeAl}/\text{MgO}/\text{Co}$ magnetic tunneling junctions, *Physical Review B* **81** (2010).
- [9] Sakurada, S., et Shutoh, N., Effect of Ti substitution on the thermoelectric properties of (Zr,Hf)NiSn half-Heusler compounds, *Applied Physics Letters* **86** (2005).
- [10] Zenasni, H., Etude Theorique des Proprietes Magnétiques, Electroniques et Structurales des Alliages Heusler, (2014).
- [11] Schuster, H. U., Hinterkeuser, H. W., Schaefer, W., et Will, G., Investigations on neutron diffraction of the phases LiAlSi and LiAlGe , (1976).
- [12] M. Morcrette, D. Larchera, J.M. Tarascona, K. Edstrom, J.T. Vaughey, M.M. Thackeray, *Electrochim Acta* **52**, 5339 (2007).
- [13] P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, *Landolt-Börnstein, - group III condensed matter*, vol. 19C. Berlin: Springer; 19, 75-184(1988).
- [14] Nowotny, H., et Sibert, W., Ternäre Valenzverbindungen in den Systemen Kupfer(Silber)-Arsen(Antimon, Wismut)-Magnesium, *International Journal Of Materials Research (Formerly Zeitschrift Fuer Metallkunde)* **33** (1941) 391-394.
- [15] Nuss, J., et Jansen, M., Demarcation of the PbFCl and Cu_2Sb structure families : Crystal structure re-determinations and refinements of CuMgSb , Cu_2Sb , and CuMgAs , (2002).
- [16] P. Villars, L.D Calvert, *Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases*. American Society of Metals; vol 1-3, 3258 (1991).
- [17] Heusler, O., Kristallstruktur und Ferromagnetismus der Mangan-Aluminium-Kupferlegierungen, *Annalen Der Physik* **411** (1934) 155-201.
- [18] Bradley, A. J., et Rodgers, J. W., The crystal structure of the heusler alloys, *Proceedings Of The Royal Society Of London Series A Containing Papers Of A Mathematical And Physical Character* **144** (1934) 340-359.
- [19] Rata, Benalia. "Etude comparative des structures de type Hg_2CuTi et Cu_2MnAl pour les alliages heusler Mn_2CoZ ($Z = \text{Al}, \text{Ga}$), (2020).
- [20] Mohammed, B., Etude de premier principe des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des matériaux Heusler de type Fe_2MnZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}$) $\text{Fe}_2\text{MnAl}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$, (2016).
- [21] Kresse, G., et Furthmüller, J., Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review. B, Condensed*

Matter **54** (1996) 11169-11186.

[22] Blöchl, P. E., Projector augmented-wave method, *Physical Review. B, Condensed Matter* **50** (1994) 17953-17979.

[23] Vanderbilt, D., Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, *Physical Review. B, Condensed Matter* **41** (1990) 7892-7895.

[24] Kurt, H., Rode, K., Venkatesan, M., Stamenov, P., et Coey, J. M. D., High spin polarization in epitaxial films of ferrimagnetic Mn₃Ga, *Physical Review B* **83** (2011).

[25] Parashu Kharel, Y. Huh, V. R. Shah, X. Z. Li, N. Al-Agtash, K. Tarawneh, E. S. Krage, Renat F. Sabirianov, Ralph Skomski, and David J. Sellmyer, *Journal of Applied Physics* **111**, 07B10 (2012).

[26] Latifa, B., Zohra, F. F., et Said, H., Study of Raw and Recycled Polyethylene Terephthalate by Meaning of TGA and Computer Simulation, *Advances In Polymer Technology* **2020** (2020) 1-7.

[27] Andrea, L., Hug, G., et Chaput, L., Ab initiophonon properties of half-Heusler NiTiSn, NiZrSn and NiHfSn, *Journal Of Physics Condensed Matter* **27** (2015) 425401.

[28] Carrete, J., Li, W., Mingo, N., Wang, S., et Curtarolo, S., Finding Unprecedentedly Low-Thermal-Conductivity Half-Heusler Semiconductors via High-Throughput Materials Modeling, *Physical Review X* **4** (2014).

[29] Toher, C., Plata, J. J., Levy, O., De Jong, M., Asta, M., Nardelli, M. B., et al., High-throughput computational screening of thermal conductivity, Debye temperature, and Grüneisen parameter using a quasiharmonic Debye model, *Physical Review B* **90** (2014).

[29] Amraoui, R., Kadri, S., Meradji, H., Berkani, M., Bouaricha, A., Ghemid, S., et al., First-principles computational study on structural, elastic, magnetic, electronic, and thermoelectric properties of Co₂MnGe : a potential Heusler ternary compound, *The European Physical Journal B* **95** (2022).

Chapitre III : Les méthodes numériques

III.1 Introduction

Les propriétés physique et chimique des matériaux dans sous les formes, atomique, liquide et solide peuvent être expliqués par le comportement de ses constituants « électron et noyau » et leurs interactions. Le comportement des électrons et des noyaux peut se manifester par des différentes expériences grâce au progrès des techniques de caractérisation. Ainsi, on a pu étudier, d'une part, un seul atome déposé sur un substrat ou les effets quantiques d'un nombre limité des électrons dominant, et d'autre part les interactions entre un nombre gigantesque des électrons cèdent naissance à des propriétés des solides. Cependant, on a dû recourir à des modèles théoriques afin d'expliquer et mieux comprendre la complexité et l'imprédictibilité de l'expérience. Ces modèles peuvent être empiriques, semi-empiriques ors microscopiques.

Une première catégorie est constituée par les méthodes empiriques utilisant ce type de paramètres d'ajustement pour adapter leurs résultats avec ceux de l'expérimental. La méthode des liaisons-fortes (ETB) [1-3], qui utilise les orbitales atomiques combinées linéairement (LCAO), est l'une des méthodes empiriques les plus couramment utilisées pour étudier le magnétisme des systèmes métalliques contenant des éléments de métaux de transition [4]. Les modèles semi-empiriques tels que les méthodes APW et KKR, créés respectivement par "Slater" (1937) [5] et "Korringa-Kohn-Rostoker" (1954), font partie de cette catégorie [6,7].

Finalement, Les méthodes ab-initio, telles que les méthodes LMTO ("Linear Muffin-Tin Orbital") et LAPW ("Linearized Augmented Plane Wave"), développées par Andersen (1975) [8, 9], ainsi que la méthode du pseudo-potentiel (PP) de Phillips-Kleinman (1959) [10-12], sont des approches qui partent de zéro et ne nécessitent pas l'utilisation de paramètres ajustables basés sur des informations expérimentales telles que la largeur de bande ou le moment magnétique. Ces derniers modèles ont comme fondement la mécanique quantique et spécifiquement l'équation de Schrödinger de plusieurs particules en interaction, et comme le nombre de particules est généralement énorme, ce qui rend la solution de l'équation de Schrödinger impraticable, d'autres alternatives ont été proposées pour surmonter cette difficulté.

Parmi ces modèles, il y a la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) qui est considérée comme la méthode la plus utilisée pour décrire les propriétés de la matière. Ce chapitre vise à présenter une description de la théorie de la DFT ("Density Functional Theory") ainsi que les

aspects pratiques de sa mise en œuvre notamment la version où on utilise les ondes planes (*ABINIT*) et la version où on utilise les orbitales Muffintin (*EMTO*) [1].

III.2 Equation de Schrödinger

L'équation de "Schrödinger" [3] est le point de démarrage de toute discussion de la mécanique quantique. La forme indépendante de l'heure de cette équation

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (\text{III-1})$$

Où $\hat{H}$ - l'opérateur Hamiltonien,

E - l'énergie totale du système,

ψ - la fonction d'onde du corps.

L'équation de Schrödinger, en unités atomiques, peut s'écrire comme suit :

$$H = T_e + T_n + V_{ne} + V_{ee} + V_{nn}$$

Soit

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_A \frac{\nabla_A^2}{M_A} - \sum_i \sum_A \frac{Z_A}{R_{Ai}} + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A < B} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (\text{III-2})$$

Où R_A et r_i les positions de M (noyaux) et N (électrons), respectivement. La distance $r_{ij} = |r_i - r_j|$ et la distance entre les noyaux A et B est $R_{AB} = |R_A - R_B|$. Z_A est le numéro atomique du noyau, tandis que M_A est sa masse en unités de la masse d'un électron. ∇_A^2 et ∇_i^2 sont les opérateurs Laplaciens.

Dans l'équation ci-dessus, les deux termes primaires représentent respectivement l'énergie cinétique des électrons et des noyaux. Le troisième terme est l'attraction de Coulomb entre les noyaux et les électrons, tandis que la répulsion entre les électrons et les noyaux est représentée respectivement par les quatrième et cinquième termes.

III.3 Approximation de Born-Oppenheimer

Résoudre l'équation de "Schrödinger " est relativement simple pour la molécule la plus simple (H^+), mais devient beaucoup plus complexe pour les systèmes moléculaires plus complexes. Dans ce cas, l'approximation de "Born-Oppenheimer " [4] est utilisée, Elle est essentielle aux calculs de structures électroniques.

L'approximation utilisée comporte à séparer l'équation de "Schrödinger" en termes nucléaires et électroniques. Cette approche repose sur la différence significative de masse entre les noyaux atomiques et les électrons. Ainsi, dans la plupart des cas, les noyaux peuvent être considérés comme des points fixes et les électrons se déplacent sous le potentiel externe fixe produit par les noyaux. La fonction d'onde électronique dépend donc uniquement de la position des noyaux et non de leur mouvement. Sous cette approximation, en examinant l'équation (III-2), on peut observer que le deuxième terme de l'équation est négligeable, en comparaison des autres termes. De plus, la répulsion électrostatique entre les noyaux est également négligeable. Par conséquent, pour des noyaux fixés, le terme final de l'équation pourrait être considéré comme une constante. Les termes restants sont le Hamiltonien électronique $\left(\hat{H}_{elec} \right)$ qui peut être écrit comme :

$$\hat{H}_{elec} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (III-3)$$

Donc la fonction d'onde électronique totale pour la molécule est :

$$\hat{H}_{elec} \psi_{elec} = E_{elec} \psi_{elec} \quad (III-4)$$

Et la solution générale de l'équation (III-2) peut être finalement écrite comme :

$$\psi_{tot}(noyaux, électrons) = \psi(électrons) \cdot \psi(noyaux)$$

Comme l'énergie totale est évidemment la somme de l'énergie électronique et nucléaire. L'énergie électronique est la somme de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique des électrons. Les électrons se déplacent dans le champ électrostatique généré par les noyaux et sont soumis à la répulsion électronique :

$$E_{tot} = E_{elec} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (III-5)$$

Dans ce cas, la résolution de l'équation (III-2) est encore complexe pour la fonction d'onde à électrons multiples, contenant 3N variables.

Afin de résoudre ce problème de plusieurs électrons, des approches spéciales ont été développées, telles que la théorie de "Thomas-Fermi" et la théorie de "Hartree Fock".

III.4 Approximation de Hartree-Fock

La méthode de "Hartree-Fock" a été introduite à la fin des années 1920 et développée en 1927 par D. R. Hartree. C'est une approximation pour la détermination de la fonction d'onde et de l'énergie d'un système à plusieurs corps dans un état stationnaire [5]. Cette théorie simplifie l'interaction électron-électron, en élargissant la fonction de nombreuses ondes électroniques en un produit de la fonction d'onde électronique unique. La fonction d'onde de l'état fondamental d'un système à N électrons est écrite comme un seul déterminant de "Slater" à N dimensions, ψ_{SD} , avec les fonctions d'une onde électronique (ψ_i) comme composantes. Le déterminant de Slater est :

$$\psi_{HF}[(X_i)] = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(X_1) & \psi_1(X_2) & \cdots & \psi_1(X_n) \\ \psi_2(X_1) & \psi_2(X_2) & \cdots & \psi_2(X_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(X_1) & \psi_n(X_2) & \cdots & \psi_n(X_n) \end{vmatrix} \quad (\text{III-6})$$

Avec cette fonction d'onde, l'équation complète de Hartree-Fock peut être écrite comme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + \Phi_i \right] \Psi_i(r) + V_{exch} \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (\text{III-7})$$

Où $V_{exch} \Psi_i(r)$ est la partie non-local d'échange ajouté.

$$V_{exch} \Psi_i(r) = - \sum_{i \neq j} \int dr \frac{\Psi_j^*(r') \Psi_i^*(r')}{|r - r'|} \Psi_j(r) \quad (\text{III-8})$$

Elle se compose de quatre termes. Les deux premiers termes représentent la contribution de l'énergie cinétique et potentielle des électrons. Le troisième terme est également connu sous le nom de terme de Hartree qui est le potentiel électrostatique généré par la distribution de charge des N électrons. Le quatrième terme, ou terme d'échange, résulte de l'exclusion du principe de Pauli.

L'approximation "Hartree-Fock" suppose une image à un seul électron de la structure électronique, c'est-à-dire que la distribution des N électrons est donnée par la somme des distributions à un électron $|\psi|^2$. Cependant, la théorie de "Hartree-Fock" a été établie en supposant une forme à un seul déterminant pour la fonction d'onde et elle néglige également la corrélation entre les électrons. Par conséquent, le potentiel moyen non local des électrons

provenant des autres électrons n'est pas pris en compte, ce qui donne une description erronée de la structure électronique. Bien que la théorie HF soit qualitativement correcte pour divers matériaux et composés, elle n'admet pas de faire des prédictions quantitatives précises.

La fonction d'onde électronique d'HF est construite en utilisant des fonctions d'onde électronique antisymétriques. Puisque dans les méthodes HF, les corrélations électroniques sont négligées et produisent avec de larges bandes passantes, des énergies plus élevées et des largeurs de bande trop faibles, l'approche HF est particulièrement adaptée aux petites molécules organiques et aux oxydes, qui ont un petit nombre d'électrons localisés. Cependant, cette approximation HF est moins appropriée pour les métaux de transition à densité électronique élevée.

En raison de l'interaction de la densité de charge moyenne des électrons, l'énergie de l'état fondamental calculée dans la théorie HF est normalement plus élevée que l'énergie réelle de l'état fondamental. La théorie échoue dans les systèmes d'électrons délocalisés parce que cette méthode ignore le criblage collectif de Coulomb. Suite à cette faiblesse de la théorie HF, la méthode DFT a été développée, pour traiter la densité électronique.

III.5 Approximation de Thomas-Fermi

La théorie de "Thomas" [6] et "Fermi" [7] constitue une vraie formulation de la théorie de la fonctionnelle de la densité ("DFT"), dans laquelle toutes les contributions à l'énergie électronique totale, qu'il s'agisse de la composante cinétique ou électrostatique, sont révélées en fonction de la densité électronique. Cela permet d'établir un lien direct entre la densité électronique et l'énergie électronique du système, qui rend les calculs et les analyses beaucoup plus simples.

La méthode de Thomas-Fermi consiste à répartir le système inhomogène en volumes élémentaires d^3r , où les électrons se comportent comme un gaz homogène avec une densité constante. Pour que cette approximation soit valide, le potentiel électrostatique V_{eff} doit varier

lentement à l'échelle de la longueur d'onde de "Fermi" $\frac{1}{k_F}$, c'est-à-dire qu'il doit être confiné aux vecteurs d'onde de magnitude inférieure à la norme de k_F .

Le potentiel est déterminé par l'action des noyaux ($V_{ext}(r) = -\frac{Znuc}{r}$) aussi par l'action électrostatique des électrons en r_2 sur ceux en r_1 .

S'exécutant de deux électrons 1 et 2 :

$$V_{eff} = V_{ext}(r) + V_{ee}(r_1, r_2), \quad (\text{III-9})$$

la résolution de l'équation de Thomas-Fermi est complexe en raison de la présence du terme de répulsion entre les électrons et du terme d'énergie potentielle lié à V_{ext} :

$$E_v = \int \rho(r) V(r) d^3r \quad (\text{III-10})$$

En effet, $V_{ee}(r_1, r_2)$ offre un terme bi-électronique difficile à calculer :

$$V_{ee} = \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d^3r_1 d^3r_2 \quad (\text{III-11})$$

Afin de simplifier l'équation, Thomas et Fermi ont proposé de remplacer le terme par une intégrale de "Coulomb" qui représente l'interaction entre deux densités électroniques. Cette intégrale peut être exprimée comme suit :

$$J_{12}[\rho] = \iint \rho(r_1) \frac{1}{r_{12}} \rho(r_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (\text{III-12})$$

Cependant, cette approche n'a pas abouti à une solution satisfaisante pour résoudre le problème, malgré le progrès réalisé par rapport au terme direct de Hartree car Cette approche ignore les effets d'échange-corrélation, qui résultent de l'influence mutuelle des positions instantanées des électrons.

III.6 Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

La "DFT" est une méthode de grande importance et considérablement utilisée à la suite de sa précision et de son efficacité de calcul élevée. Elle permet de considérer la structure des solides cristallins et leurs interactions en se concentrant sur la distribution de densité de charge électronique plutôt que sur la fonction d'onde à plusieurs électrons. Cette approche offre une démarche plus pratique et moins coûteuse par calculs, pour enquêter sur les propriétés électroniques et structurales des matériaux. La "DFT" présente l'avantage d'être facilement applicable à des systèmes de grande taille, car elle repose sur l'utilisation de densités électroniques. Cela en fait une méthode pratique pour étudier des systèmes complexes et de grande envergure.

Des ouvrages spécialisés [8, 9] ainsi que des articles de revue [10, 12] proposent des discussions approfondies sur la "DFT". Bien que la méthode "DFT" soit précise pour les états fondamentaux, elle présente certaines limites dans la représentation de la fonctionnelle

d'échange et de corrélation. Afin de compenser ces limitations, différentes approximations sont utilisées pour améliorer le modèle et prendre en compte de manière plus précise les interactions d'échange et de corrélation. Ces approximations permettent ainsi de raffiner les prédictions de la DFT et d'obtenir des résultats plus conformes aux données expérimentales.

III.6.1 Théorèmes de Hohenberg et Kohn

"Hohenberg et Kohn " [13] ont présenté en 1964 la théorie moderne de la "DFT " des systèmes à plusieurs corps où la théorie fonctionnelle de la densité est basée sur deux théorèmes simples, mais extrêmement importants, connus par le théorème de Hohenberg-Kohn. Nous présentons ici ces deux théorèmes comme indiqué dans le livre Electronic Structure : "Basic Theory and Practical Methods", publié par "Martin" [14].

• **Théorème 1.** Énonce que pour tout système de particules en interaction soumis à un potentiel externe $V_{ext}(r)$, ce potentiel $V_{ext}(r)$ est entièrement déterminé, à une constante près, par la densité de particules à l'état fondamental $n_0(r)$.

Il est alors conclu de ce théorème que toutes les propriétés du système sont complètement résolues étant donné seulement la densité de l'état fondamental $n_0(r)$ [15].

• **Théorème 2.** Énonce qu'il est possible de définir une fonction universelle de l'énergie $E[n]$ en termes de la densité $n(r)$, qui est valable pour tout potentiel externe $V_{ext}(r)$. Pour chaque potentiel externe spécifique $V_{ext}(r)$, l'énergie exacte à l'état fondamental du système est obtenue en minimisant cette fonction universelle, et la densité $n(r)$ qui minimise cette fonctionnelle est la densité exacte de l'état fondamental $n_0(r)$. En d'autres termes, en utilisant cette fonctionnelle, on peut déterminer l'énergie et la densité à l'état fondamental de manière précise et exacte pour tout potentiel externe donné.

De ce théorème, il résulte que les fonctions $E[n]$ permettent de trouver l'énergie et la densité de l'état fondamental [15]. En fait, cette fonctionnalité peut être considérée comme :

$$E[n] = F[n] + \int V_{ext}(r)n(r)d^3r + E_{II} \quad (III-13)$$

Où E_{II} - est l'énergie d'interaction des noyaux

$F[n]$ - est une fonctionnelle universelle de la densité incluant toutes les énergies internes (cinétique, $T[n]$ et potentiel, $E_{int}[n]$) du système d'électrons en interaction [15] :

$$F[n] = T[n] + E_{int}[n] \quad (III-14)$$

Alors que les théories de Hohenberg-Kohn prouvent l'existence d'une solution exacte à l'état fondamental du système, ils n'offrent pas une approche pratique pour son calcul.

III.6.2 Les équations de Kohn-Sham

Pour appliquer le formalisme "DFT", il faut une meilleure approximation de la fonctionnelle $F[n(r)]$. L'approximation correcte de "Kohn-Sham" (KS) [15] consiste à remplacer le problème du système original à plusieurs corps par un système de particules indépendantes auxiliaires qui aura la même densité d'état fondamental mais sera plus facile à résoudre. L'un des principaux avantages de cette approximation réside dans sa simplicité de calcul de l'énergie cinétique. Cette méthode a été introduite en 1965 et **"Kohn a reçu le prix Nobel de chimie en 1998, avec John Pople"**.

L'Hamiltonien auxiliaire indépendant est :

$$\hat{H}_{KS} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS}(r) \quad (\text{III-15})$$

Afin d'évaluer l'énergie cinétique d'un système à N particules indépendantes, Kohn et John Pople ont déterminé le potentiel correspondant $V_{KS}(r)$, en résolvant le système à un électron de N équations de Schrödinger :

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{KS}(r)\right)\psi_i(r) = \varepsilon_i\psi_i(r) \quad (\text{III-16})$$

Chacune des N orbitales $\psi_i(r)$ a un électron avec les valeurs propres les plus basses ε_i , avec la densité :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2 \quad (\text{III-17})$$

La condition de normalisation est :

$$N = \int \rho(r) dr \quad (\text{III-18})$$

L'énergie cinétique des particules indépendantes $T_s[\rho(r)]$ des particules non-interactives est :

$$T_s[\rho(r)] = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int \psi_i^*(r) \nabla^2 \psi_i(r) dr \quad (\text{III-19})$$

La fonctionnelle universelle $F[\rho(r)]$ est :

$$F[\rho(r)] = T_s[\rho(r)] + E_H[\rho(r)] + E_{XC}[\rho(r)] \quad (\text{III-20})$$

Où $E_H[\rho(r)]$ représente l'énergie électrostatique classique des électrons,

$$E_H[\rho(r)] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (\text{III-21})$$

et $E_{XC}[\rho(r)]$ est l'énergie d'échange-corrélation.

$$V_{KS}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{XC}(r) \quad (\text{III-22})$$

Où $V_H(r)$ est le potentiel de Hartree

$$V_H(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \quad (\text{III-23})$$

et $V_{XC}(r)$ est le potentiel d'échange-corrélation donné par :

$$V_{XC}(r) = \frac{\delta E_{XC}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (\text{III-24})$$

Les équations (III-22), (III-23) et (III-24) sont les équations de KS. Ces équations sont auto-cohérentes car $V_{XC}(r)$ dépend de la densité.

La définition de l'énergie fonctionnelle E_{XC} est :

$$E_{XC}(r) = T[\rho(r)] - T_S[\rho(r)] + E_{int}[\rho(r)] + E_H[\rho(r)] \quad (\text{III-25})$$

Où $T[\rho(r)]$ et $E_{int}[\rho(r)]$ représentent respectivement les énergies cinétiques et d'interaction électron-électron du système.

III.6.3 La fonctionnelle d'échange-corrélation

Les équations ci-dessus fournissent une bonne méthode pour trouver l'énergie de l'état fondamental d'un système en interaction lorsque la forme de E_{XC} est connue. Cependant, la forme de E_{XC} a été calculée uniquement pour quelques systèmes simples, donc ce terme est généralement inconnu.

Le terme E_{XC} est couramment approché dans les calculs de structure électronique dans l'approximation de densité locale ou l'approximation de gradient généralisée. Durant les dernières décennies, plusieurs auteurs ont publié des formes différentes pour la fonction E_{XC} .

La première méthode a été proposée par Perdew et s'appelle aussi l'échelle de Jacob [16]. Il a présenté les types simples de fonction d'échange-corrélation qui sont les suivants :

✓ *Approximation de la densité locale ("LDA")*

L'approximation de la densité locale est la méthode la plus couramment utilisée et la plus simple pour estimer l'énergie d'échange et de corrélation ("LDA : local density approximation").

L'approximation de la densité locale ("LDA") repose sur l'idée que le potentiel d'échange et de corrélation peut être considéré comme une quantité locale, dépendant principalement de la densité électronique en un point donné r et ne variant que faiblement avec les variations de densité dans les environs de ce point. L'énergie d'échange - corrélation totale E_{XC} s'expose en fonction de l'énergie d'échange et corrélation par électron ε_{XC} telle que :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}(\rho(r)) dr \quad (III-26)$$

En d'autres termes, on fait l'hypothèse qu'environ de chaque point r , le système réel peut être approximé par un gaz homogène d'électrons avec une densité électronique locale $\rho(r)$. La fonction $\varepsilon_{XC}^{hom}(\rho)$ se décompose en une contribution d'échange $\varepsilon_X(\rho)$ et de corrélation $\varepsilon_C(\rho)$:

$$\varepsilon_{XC}(\rho(r)) = \varepsilon_X(\rho(r)) + \varepsilon_C(\rho(r)) \quad (III-27)$$

Le terme d'échange d'un tel gaz a été calculé de manière exacte à l'aide de la technique "Monte-Carlo par Ceperley et al" [17] qui ont tabulé le terme d'échange-corrélation $\varepsilon_{XC}^{hom}(\rho)$ en fonction du rayon de Wigner-Seitz :

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (III-28)$$

Plusieurs travaux de paramétrisation de $\varepsilon_{XC}^{hom}(\rho)$ ont été réalisés pour déterminer la fonctionnelle d'échange-corrélation, tels que ceux réalisés par "Perdew et Zunger" [18].

L'approximation de la densité de spin locale "LSDA" est une version de "LDA" qui prend en compte le spin électronique. L'énergie d'échange et de corrélation E_{XC} se transforme une fonctionnelle des deux densités de spin haut et bas :

$$E_{XC}^{LSDA}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}(\rho \uparrow(r), \rho \downarrow(r)) dr \quad (III-29)$$

Avec

$$\varepsilon_{XC} = \varepsilon_{XC}^{\text{homo}}(\rho(r)) \quad (\text{III-30})$$

Malgré sa simplicité conceptuelle, l'approximation "LDA" permet de déterminer des résultats satisfaisants. La description locale de la densité dans la "LDA" conduit à une précision surprenante. Cependant, quelques quantités comme l'énergie de cohésion sont surestimées, tandis que d'autres, comme les paramètres de maille et les longueurs de liaison, sont sous-estimées. Parfois, l'approximation "LDA" donne une description insatisfaisante des propriétés de certains systèmes. Par exemple, l'état fondamental du fer à température ambiante est désigné comme étant une structure cfc γ , alors qu'en réalité il s'agit d'une structure α cc. Cette approximation montre les limites particulièrement pour les actinides et les lanthanides.

III.6.4 L'approximation du gradient généralisé (GGA)

L'objectif principal de l'utilisation de l'approximation "GGA" ("Generalized Gradient Approximation") est de prendre en compte les différences entre les systèmes réels et un gaz d'électrons uniforme. En général, on peut constater que les systèmes réels tels que les atomes ou les molécules ne sont pas homogènes. Pour cette raison, le formalisme de correction pour décrire la fonctionnelle d'échange-corrélation a été progressé. La "GGA" est un procédé non local qui dépend uniquement de la densité électronique, $E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})]$ et son gradient $\nabla[\rho(\vec{r})]$. La fonctionnelle est de la forme [19] :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r}), |\nabla[\rho(\vec{r})|] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{III-31})$$

Dans ce nouveau formalisme, le terme de l'énergie d'échange-corrélation par particule dans un système électronique inhomogène est représenté par :

$$\varepsilon_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r}), |\nabla[\rho(\vec{r})|] \quad (\text{III-32})$$

Compte tenu de l'utilisation extensive de la "DFT" en tant que mécanisme pour décrire différentes propriétés physiques des matériaux, différentes formules "GGA" ont été améliorées, l'approximation "GGA" a montré la fiabilité et la précision de la simulation pour différents matériaux. La fonction "GGA" améliore également la fiabilité de l'énergie totale [20,21] et les bandes d'énergie à la structure de la bande. Cette approche permet une description améliorée des systèmes magnétiques et optiques des systèmes non uniformes.

La "GGA" proposée par "Pedrew-Burke et Ernzerhoft" [22] est utilisée dans cette thèse.

III.6.5 Résolution des équations de Kohn-Sham

Les équations "KS" doivent être résolues de manière cohérente car le potentiel "KS" effectif " V_{KS} " et la densité électronique " $n(r)$ " sont étroitement liés. Ceci est généralement effectué numériquement à l'aide de certaines itérations auto-cohérentes, comme illustré à la figure III-1 ci-dessous. Le processus commence par une densité électronique initiale, généralement une superposition de densité électronique atomique, puis le potentiel "KS" efficace " V_{KS} " est calculé et l'équation "KS" est résolue avec des valeurs propres et des fonctions d'onde, une nouvelle densité électronique est ensuite calculée à partir des fonctions d'onde. Après cela, les conditions auto-cohérentes sont vérifiées.

Les conditions auto-cohérentes peuvent être le changement de "l'énergie totale" ou de "la densité électronique" de l'itération précédente ou la force totale agissant sur les atomes est inférieure à une petite quantité choisie ou une combinaison de ces conditions individuelles. Si la cohérence n'est pas atteinte, la densité électronique calculée sera mélangée avec la densité électronique des itérations précédentes pour obtenir une nouvelle densité électronique. Une nouvelle itération commencera avec la nouvelle densité électronique. Ce processus continue jusqu'à l'auto-cohérence soit aboutie. Une fois l'auto-consistance atteinte, différentes quantités peuvent être calculées, dont l'énergie totale, les forces, les contraintes, les valeurs propres, etc....

L'étape la plus consommatrice de temps dans l'ensemble du processus consiste à résoudre les équations KS avec un potentiel KS donné par V_{KS} .

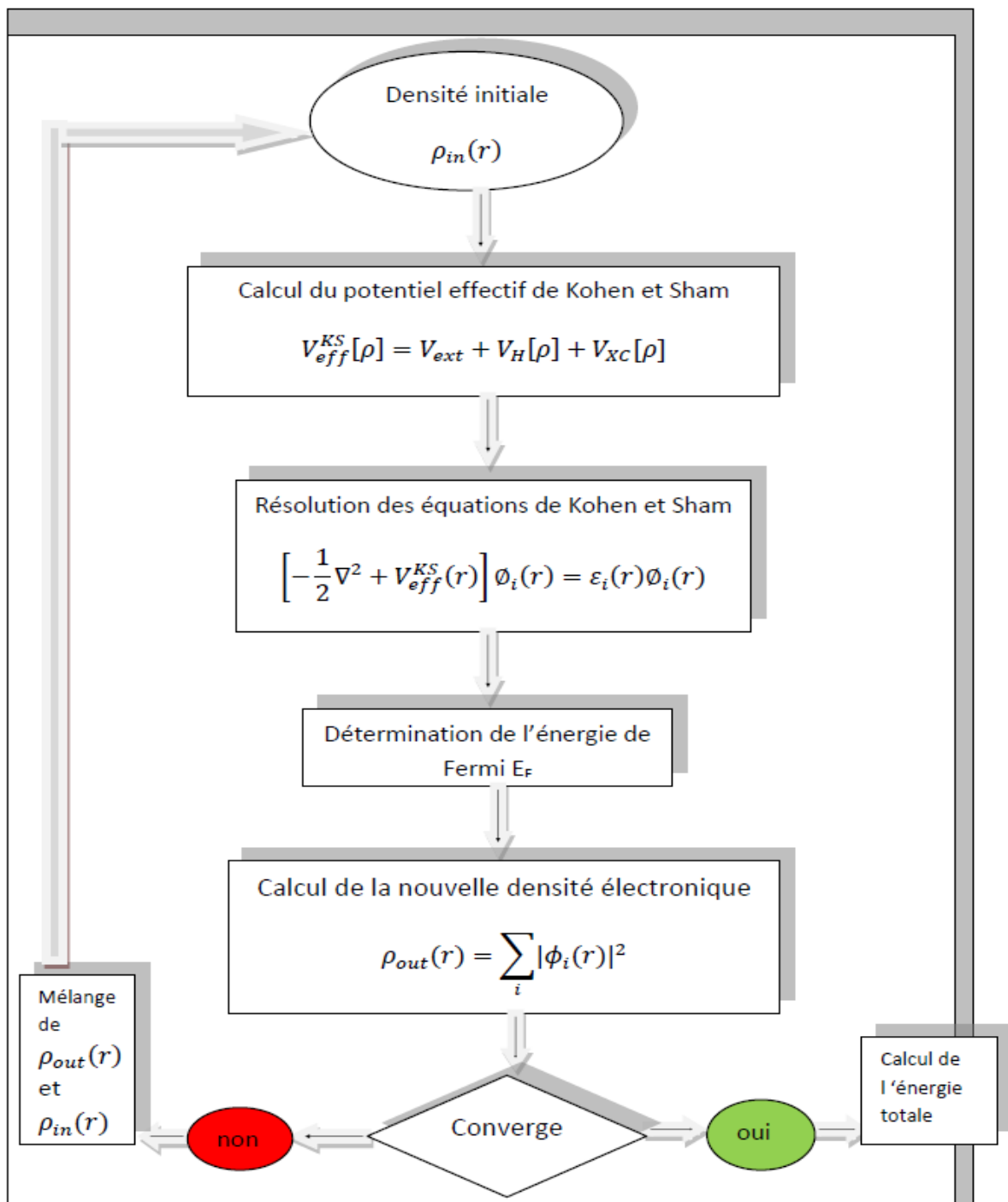


Figure III.1 : La DFT représentée sous forme d'un diagramme [23].

III.7 Méthode des ondes planes augmentées et linéarisées FP-LAPW

III.7.1 Introduction

"La théorie de la fonctionnelle de la densité" est une approche robuste pour traiter les systèmes à plusieurs corps. Cependant, le choix approprié d'une base de fonctions d'onde est crucial pour résoudre les équations de "Kohn-Sham". Il existe plusieurs méthodes pour calculer les structures de bandes, toutes basées sur la résolution auto-cohérente des trois équations de "Kohn et Sham". Ces méthodes sont généralement classées en trois catégories principales en fonction de leur dépendance vis-à-vis des données expérimentales ou des données fondamentales :

Les méthodes empiriques requièrent des données expérimentales pour effectuer leurs calculs, tandis que les méthodes semi-empiriques utilisent à la fois des données expérimentales et des données fondamentales. En revanche, les méthodes "ab-initio" se basent uniquement sur des données fondamentales pour leurs calculs. Au cours des dernières années, les chercheurs ont fait des avancées dans le développement de méthodes "ab-initio" basées sur des principes théoriques, c'est-à-dire des méthodes qui ne nécessitent pas de paramètres ajustés empiriquement. Ces approches, communément appelées méthodes "premiers principes", reposent sur les interactions fondamentales entre les électrons et les noyaux atomiques pour effectuer les calculs.

Parmi ces méthodes on trouve la LCAO [23,24], OPW [25,26], APW ...etc. Les méthodes linéarisées développées par Andersen ont considérablement accéléré les calculs, permettant ainsi de gagner un temps précieux [28] : Ondes planes augmentées et linéarisées ("LAPW") et orbitales « Muffin-Tin » linéarisées ("LMTO").

III.7.2 Méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (FP-LAPW)

La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (LAPW), développée par Andersen [26], constitue essentiellement une amélioration de la méthode des ondes planes augmentées (APW) élaborée précédemment par Slater [28, 31]. Pour saisir pleinement le fonctionnement de la méthode LAPW, il est nécessaire de comprendre les principes sur lesquels elle se fonde et dont elle tire ses origines.

III.7.2.a Méthode des ondes planes augmentées (APW)

La méthode "APW" est le moyen le plus courant de résoudre les structures électroniques en exploitant les équations de "Kohn-Sham" (KS). Slater a proposé la technique en 1937 [26,28].

Dans cette approche, dans le schéma "APW", la cellule unitaire est fragmentée en deux caractères de régions : (i) des sphères centrées autour de tous les sites atomiques r_α de rayon R_α , et (ii) la région interstitielle restante (Figure.III.1). Dans ce cas, les fonctions d'onde sont étendues en onde plane (PW) dont chacune est augmentée par des solutions atomiques sous la forme d'ondes partielles, c'est-à-dire une fonction radiale multipliée par des harmoniques sphériques. En particulier, des solutions radiales de l'équation de "Schrödinger" sont employées à l'intérieur de sphères non atomisées centrées sur les atomes et d'ondes planes dans la zone interstitielle restante.

L'introduction d'un tel ensemble de base est due au fait que près des noyaux, les fonctions d'onde et le potentiel sont très similaires à celles d'un atome, tandis que les atomes sont plus loin. Les APW comprennent :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \sum_{lm} a_{lm}^\alpha u_{lm}^\alpha(r, \varepsilon), & r < R_\alpha \\ \Omega^{-\frac{1}{2}} \sum_G C_G \exp(i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}), & r \in I \end{cases} \quad (\text{III-33})$$

φ fonction d'onde, Ω volume de la cellule unitaire, $\vec{r}$ sphère de position α avec les coordonnées polaires $\vec{r}$, $\vec{k}$ vecteur d'onde dans la zone de "Brillouin" irréductible (IBZ) et u_{lm} solution numérique de l'équation de "Schrödinger" radiale à l'énergie ε . Les orbitales KS $\psi(r)$ sont exprimées également une combinaison linéaire de APW $\varphi(r)$.

Un ensemble dépendant de l'énergie différent des fonctions de base "APW" doit être trouvé pour chaque énergie propre. C_G et a_{lm} sont des coefficients de dilatation, E_l est un paramètre (défini égal à l'énergie de la bande) et V la composante sphérique du potentiel dans la sphère.

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right] r u_{lm}(r) = 0 \quad (\text{III-34})$$

L'utilisation de ces fonctions a été motivée par "Slater", qui a remarqué que les ondes planes sont des solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant, tandis que les

fonctions radiales sont des solutions dans un potentiel sphérique. Cette approximation du potentiel, connue sous le nom de "muffin tin" (MT), a été ainsi mise en œuvre. Pour assurer la continuité aux limites des sphères dans la représentation double définie par l'équation (2), il est nécessaire d'imposer une contrainte. Dans la méthode "APW", cela est réalisé en définissant le potentiel $V(r)$ en termes de fonctions harmoniques sphériques de l'expansion des ondes planes.

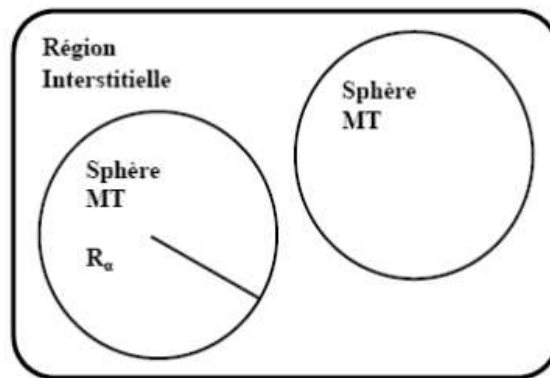


Figure III.2 : Potentiel Muffin-Tin «MT» [28].

Dans la technique "APW", on continue à utiliser des ensembles de base (fonctions) qui couvrent tout l'espace dans la sphère. Cependant, "APW" est une technique fréquemment utilisée pour les calculs des propriétés structurales, électroniques, optiques et magnétiques des solides, mais même dans ce cas, elle présente certains inconvénients. Un exemple de la limitation de cette technique est : il ne peut pas être prolongé au-delà de l'approximation moyenne sphérique muffin-tin. Les fonctions de base, pour cette approche, ont un problème à la frontière du muffin-tin et donc à la frontière leurs dérivés sont discontinus. Un autre inconvénient de cette approche est que la fonction radiale $u_m(r, E_l)$ dépend de l'énergie, ce qui conduit à un problème de valeur propre non linéaire. Cela peut entraîner des complications numériques si u_l devient très petit à la limite de la sphère vide.

III.7.2.b Principe de la méthode FP-LAPW

La technique APW est modifiée par Anderson et est appelée méthode "LAPW" [27]. L'approche "LAPW" résout les problèmes de la méthode "APW", c'est-à-dire que les fonctions de base et leur première dérivée sont interrompues à la frontière muffin-tin entre la région centrale et la région interstitielle. Pour résoudre le problème, Anderson a introduit un schéma de linéarisation et c'est pourquoi, il a utilisé le terme méthode LAPW ("Linéarized Augmented Plan Wave"). Il a rajouté un terme supplémentaire dans la base de la sphère MT.

Dans la technique LAPW à l'intérieur de la région MT, la fonction d'onde radiale est linéarisée par une combinaison linéaire de $u_{lm}(r, E_l)$ et $\dot{u}_{lm}(r, E_l)$ [29,31] :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \sum_{lm} a_{lm}^\alpha u_{lm}^\alpha(r, \varepsilon) + b_{lm}^\alpha \dot{u}_{lm}(r) Y_{LM}(\vec{r}), r < R_\alpha \\ \Omega^{-\frac{1}{2}} \sum_G C_G \exp(i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}), r \in I \end{cases} \quad (\text{III-35})$$

Où les b_{lm} des coefficients pour la dérivée d'énergie analogue à a_{lm} . À l'intérieur des sphères, les fonctions de base sont obtenues en combinant linéairement des fonctions radiales $u_l(r)$, $\dot{u}_l(r)$ et leurs dérivées d'énergie $u_l(r)Y_{lm}(r)$ et $\dot{u}_l(r)Y_{lm}(r)$ sont les fonctions d'augmentation. Les u_l sont définis comme dans la méthode APW selon l'équation (3) et la dérivée d'énergie, $\dot{u}_l(r)Y_{lm}(r)$, vérifie l'équation suivante :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right] r \dot{u}_{lm}(r) = 0 \quad (\text{III-36})$$

Les LAPW offrent une base convenablement flexible pour correctement décrire les fonctions d'ondes propres avec des énergies proches de l'énergie de linéarisation, qui peuvent être maintenues constantes. Ce schéma nous permet de déterminer toutes les énergies propres par une seule diagonalisation, ce qui le différencie de la méthode "APW" où plusieurs diagonalisations sont nécessaires.

Dans cette méthode, aucune approximation de forme n'est utilisée, et donc cette approche est souvent désignée sous le nom de "LAPW à potentiel total". L'approximation plus ancienne du muffin-tin consiste à conserver uniquement les composantes u_l et $\dot{u}_l$ dans l'équation (3). On effectue ainsi une moyenne sphérique à l'intérieur des sphères et une moyenne volumique dans la région interstitielle.

Les LAPW ont plus de liberté variationnelle à l'intérieur des sphères que les APW. Cette énorme flexibilité est due à la présence de deux fonctions radiales au lieu d'une. Les potentiels non sphériques à l'intérieur des sphères peuvent maintenant être traités sans difficulté. Il y a cependant un prix à payer pour la flexibilité additionnelle des LAPW : les fonctions de base doivent avoir des dérivées continues et par conséquent des coupures d'ondes planes plus élevées

un niveau de convergence donné. La solution des équations KS est élargie dans cette base combinée selon la méthode de variation linéaire :

$$\psi_k = \sum_n C_n \varphi_{kn} \quad (\text{III-37})$$

Et les coefficients C_n sont déterminés par l'origine variationnelle de Rayleigh-Ritz. La convergence de cet ensemble de base est vérifiée par un paramètre de coupure $R_{mt} \times K_{max}$, où R_{mt} le plus petit rayon de sphère atomique dans la cellule unitaire et K_{max} l'amplitude du plus grand vecteur K_n de l'équation (III-37).

III.7.3 Les rôles des énergies de linéarisation E_l

Les fonctions d'onde augmentées ul et ul doivent remplir la condition d'orthogonalité avec les états de cœur à l'intérieur de la sphère MT. Cependant, cette condition ne s'applique que lorsque les états de cœur possèdent la même valeur de. Par conséquent, pour réaliser le calcul, une modification est nécessaire.

La solution parfaite dans de tels cas serait d'utiliser un développement en orbitales locales. Cependant, cette option n'est pas toujours disponible dans tous les programmes, et donc, il faut choisir un rayon de la sphère aussi grand que possible pour résoudre le problème.

Finalement, il est essentiel de noter que les différents paramètres (par exemple, les énergies de linéarisation) doivent être définis de manière indépendante les uns des autres. Afin d'obtenir une description précise de la structure électronique, le paramètre ϵ doit être choisi aussi proche que possible de l'énergie de bande si celle-ci a la même valeur.

III.7.4 Développement de la LAPW en orbitales locales

Le but de la méthode "LAPW" est de remporter des énergies de bande précises autour des énergies de linéarisation [32]. Dans la plupart des matériaux, il est généralement suffisant de choisir ces énergies près du centre des bandes. Cependant, il existe des matériaux pour lesquels un seul choix de ϵ n'est pas suffisant pour calculer toutes les bandes d'énergie. Cela se produit dans les matériaux qui ont des orbitales partiellement remplies [33,34] et dans les métaux de transition. Dans ces cas, un choix judicieux de plusieurs valeurs de ϵ est nécessaire pour obtenir une description précise des énergies de bande.

III.7.4.a Méthode LAPW+LO

Comme mentionné ci-dessus, dans certains cas il peut y avoir plus d'un état de valence (ou semi cœur) avec la même valeur de l , ce qui rend difficile de choisir une énergie de linéarisation pertinente E_l . Pour résoudre ce problème et améliorer la linéarisation, Singh et al [37]. Ont introduit des orbitales locales (LO) qui augmentent la base "LAPW" définie pour certaines valeurs de l . Cette méthode est connue sous le nom de "LAPW + LO", où les LO sont définis comme

$$\varphi(r) = \begin{cases} 0, r > R_{MT} \\ \left[A_{lm} U_l(r, E_{l,1}) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_{l,1}) + C_{lm} U_l(r, E_{l,2}) \right] Y_{lm}(r), r < R_{MT} \end{cases} \quad (\text{III-38})$$

Ici $E_{l,1}$ et $E_{l,2}$ sont des énergies de linéarisation convenant respectivement aux états le plus élevé et le plus bas [38]. En d'autres termes, LO, $\varphi(r)$ est construit à partir des fonctions radiales LAPW à l'énergie $E_{l,1}$, et une troisième fonction radiale U à une seconde énergie $E_{l,2}$, choisie pour améliorer au mieux la linéarisation. Puisque les LO ne sont pas assemblés à des ondes planes au région interstitielle, ils n'ont pas de dépendance k ou G . Les trois coefficients A_{lm} , B_{lm} et C_{lm} sont déterminés par les exigences selon lesquelles les LO devraient être normalisés et devraient également avoir une valeur nulle et une pente à la limite de la sphère "muffin-tin" [39,40]. Par exemple, ajouter les LO pour les états p et d de tous les atomes d'une cellule avec N atomes augmente la base définie par $(3 + 5) \times N \text{ atome} = 8N \text{ atome}$, ce qui n'est pas un grand nombre par rapport à la taille d'un ensemble de base spécifique [17]. Les LO se sont révélés plus efficaces pour améliorer la linéarisation que les méthodes alternatives avec des APW ayant des dérivées continues secondes et troisièmes [38].

III.7.4.b Méthode APW+lo

Les fonctions de base APW peuvent également être modifiées de la même manière que les fonctions LAPW en introduisant des orbitales locales. Sjusted et al. [41] ont amélioré l'APW en introduisant une base locale orbitale (lo), c'est-à-dire APW + lo. Similaire de l'approche APW, la fonction d'onde radiale est évaluée à énergie fixe mais cette nouvelle technique inclut un autre type d'orbitale pour la flexibilité. Ces orbitales sont notées lo au lieu de LO dans le LAPW [42] :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \left[a_{lm}^{\alpha 10} u_{lm}^{\alpha}(r, \varepsilon) + b_{lm}^{\alpha 10} \dot{u}(r) \right] Y_{lm}(\vec{r}), r < R_{\alpha} \\ 0, r \in l \end{cases} \quad (\text{III-39})$$

La condition de normalisation que la fonction $\varphi(r)$ aux rayons MT est nulle ne détermine les deux coefficients de l'équation. Dans cette approche, u_l ne dépend pas des ondes planes et est inclus uniquement pour l'ensemble sélectionné des l nombres quantiques. Le terme dérivé d'énergie, dans l'approche APW + lo, est seulement inclus dans quelques lo et pas dans tous les plans vagues comme ça dans le LAPW. Par conséquent, nous ne sommes pas sûrs que la linéarisation d'énergie d'APW + bas soit précise comme LAPW, bien qu'elle converge plus rapidement que LAPW et donne la même précision que la technique LAPW [43].

III.7.5 Concept de la méthode FP-LAPW

L'approximation "muffin-tin" a été fréquemment utilisée en 1970 dans les techniques APW et LAPW [44]. Dans la région interstitielle, le potentiel est considéré comme constant, tandis que dans la région muffin-tin, il est supposé être sphériquement symétrique. Ces approximations sont efficaces dans des systèmes hautement coordonnés comme les structures métalliques centrées sur le visage.

Ces approches ne sont pas très efficaces dans les calculs des paramètres structurales et électroniques des solides à structure ouverte et à liaison covalente. Pour ce type de composés, Les résultats obtenus à partir des calculs montrent des divergences par rapport aux données expérimentales. Afin d'obtenir de meilleures prédictions pour les propriétés de ses composés, aucune approximation de forme n'est utilisée. Ces composés sont traités avec la méthode FP-LAPW. Celle-ci combine la base LAPW avec le traitement du potentiel total sans inclure l'approximation de forme dans les régions interstitielle et muffin-tin [45]. Dans l'approche FP-LAPW, le potentiel est étendu dans deux régions de telle sorte que (a) à l'intérieur de la sphère atomique il est dans les harmoniques de réseau et (b) dans la région interstitielle comme série de "Fourier" [45] :

$$V(\vec{r}) = \sum_{LM} V_{LM}(r) Y_{LM}(\vec{r}) \quad (\text{III-40})$$

$$V(\vec{r}) = \sum_{LM} V_{LM}(r) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{III-41})$$

Où (40) exprime le potentiel à l'intérieur de la sphère atomique, alors que (41) exprime le potentiel à l'extérieur de la sphère atomique. Ce schéma est communément désigné sous le nom de "schéma de potentiel total". La sélection des rayons de la sphère dans l'approximation muffin-tin est très critique mais pas dans le FP-LAPW.

III.7.6 LE CODE WIEN2K

III.7.6.a Vue d'ensemble du code

Le Wien est un code qui fonctionne sous Linux ou UNIX, et il a été développé à Inst.f Materials Chemistry-Austria, publié par Blaha et al en 1990. Afin de l'améliorer et de le rendre adaptable à différents calculs et de traiter plusieurs propriétés physiques des matériaux, le code de Wien a subi plusieurs changements et chaque changement prend une notation publiée qui dépend de l'année de publication, par exemple Wien93, Wien95, Wien97, Wien2k (2000 année de publication). Cette thèse a été développée et réalisée avec la version Wien2k_14.2 qui présente le meilleur avantage est limites de période de calcul et de formalisme utilisé pour le calcul des propriétés physiques des systèmes, l'efficacité et la fiabilité.

W2web signifie le Wien to Web Le code Wien2k a démontré son efficacité dans le domaine de la chimie et de la physique de la matière, basé sur la méthode des ondes planes augmentées, mis en œuvre au sein de la DFT. Ce paquet est un ensemble de programmes indépendants écrits avec Fortran et calcule plusieurs propriétés. Ce code permet d'estimer les paramètres optiques comme l'absorption, la réflectivité, l'indice de réfraction, la conductivité optique ... etc. Il peut également traiter l'énergie du système et l'optimisation des structures, propriétés structurales, thermodynamique (enthalpie ... etc), et propriétés magnétiques (calcul de l'état ferromagnétique et anti-ferromagnétique pour étudier la stabilité magnétique des systèmes), polarisation, etc.

III.7.6.b Détails de calcul

Nous commençons dans n'importe quel calcul des différentes propriétés physiques des matériaux par la procédure suivante :

Premièrement, nous définissons le fichier "input" ou les données d'entrée avec l'extension case.struct, ce fichier montre la structure du matériau. Il contient les paramètres de la cellule unitaire, les positions atomiques du matériau et le nombre d'atomes différents. Ensuite, nous procédons à l'initialisation de notre calcul en appliquant une série de programmes qui seront entrés dans les programmes principaux du code, ainsi nous exécutons la commande `init_lapw` pour initialiser les sous-programmes suivants :

NN : Un sous-programme qui initialise le calcul et détermine l'espace entre les voisins les plus proches d'une certaine limite. Il a défini le facteur F de distance qui est souvent égal à deux. Il traite et contrôle un chevauchement entre des sphères atomiques en ajustant le rayon atomique, son fichier de sortie est case.outputnn.

Sgroup : Il définit et permet de déterminer avec précision le groupe d'espace de la structure étudiée, le fichier de sortie est case.struct.sgroup.

SYMMETRY : C'est un programme qui traite "les opérations de symétrie du groupe spatial" étudié à partir des données d'entrée. Il détermine également le groupe de points de différents sites atomiques et la matrice de rotation correspondant aux opérations. Il est donc responsable de la génération des harmoniques sphériques lm.

LSTART : Il est responsable de la génération des densités électroniques des atomes libres, et il nécessite la sélection du "potentiel d'échange et de corrélation" à utiliser dans le calcul : LSDA (Perdew et Wang), GGA (Perdew et Wang et al Perdew 96 et 92). Dans ce sous-code, nous spécifions l'énergie de "coupure" qui sépare les états de valence et ceux du noyau, elle est généralement égale à -6,0 Ry.

Il est également à noter que dans le START, Il peut démontrer la manière dont les orbitales sont traitées lors du calcul de la structure de bande, le traitement des états de valence avec ceux de semi-core ou core, et le calcul avec orbitale locale ou sans LO.

KGEN : Il spécifie le nombre de K-point afin de créer une cellule dans la zone Brillouin irréductible (IBZ).

DSTART : Il est basé sur une "superposition de densités atomiques" réalisées par le sous-code LSTART, DSTART porte donc la densité initiale pour commencer à calculer un cycle auto-cohérent (SCF).

Après avoir initié tous ces sous-programmes, tous les fichiers "input" requis dans le calcul SCF sont créés, et la SCF exécute un ensemble de programmes qui initialise la commande run_lapw, ce processus est itéré jusqu'à la convergence (énergie, densité) soit acquis.

LAPW0 : de la densité, ce sous-programme calcule " le potentiel de Coulomb" [24] et le potentiel de "corrélacion d'échange", il génère le fichier case.scf.

LAPW1 : calculer "les valeurs propres" et "les vecteurs d'énergie" en diagonalisant la matrice, ceci permet de calculer les bandes de valence. Le fichier de sortie est case.scf1 et case.vector.

LAPW2 : En utilisant "les vecteurs propres et l'énergie de Fermi" comme données d'entrée, on peut obtenir les résultats souhaités, la densité de valence est calculée. Le fichier de sortie est case.scf2.

LCORE : Il génère des énergies et des états de core et le fichier de sortie est "case. scfc".

MIXER : dans ce sous-code, les densités des états de cœur, des états de semi-noyau et de valence sont ajoutées afin de produire une nouvelle densité totale qui sera une densité initiale pour une itération suivante.

Ci-dessous nous présentons le diagramme de fonctionnement du code "WIEN2k" :

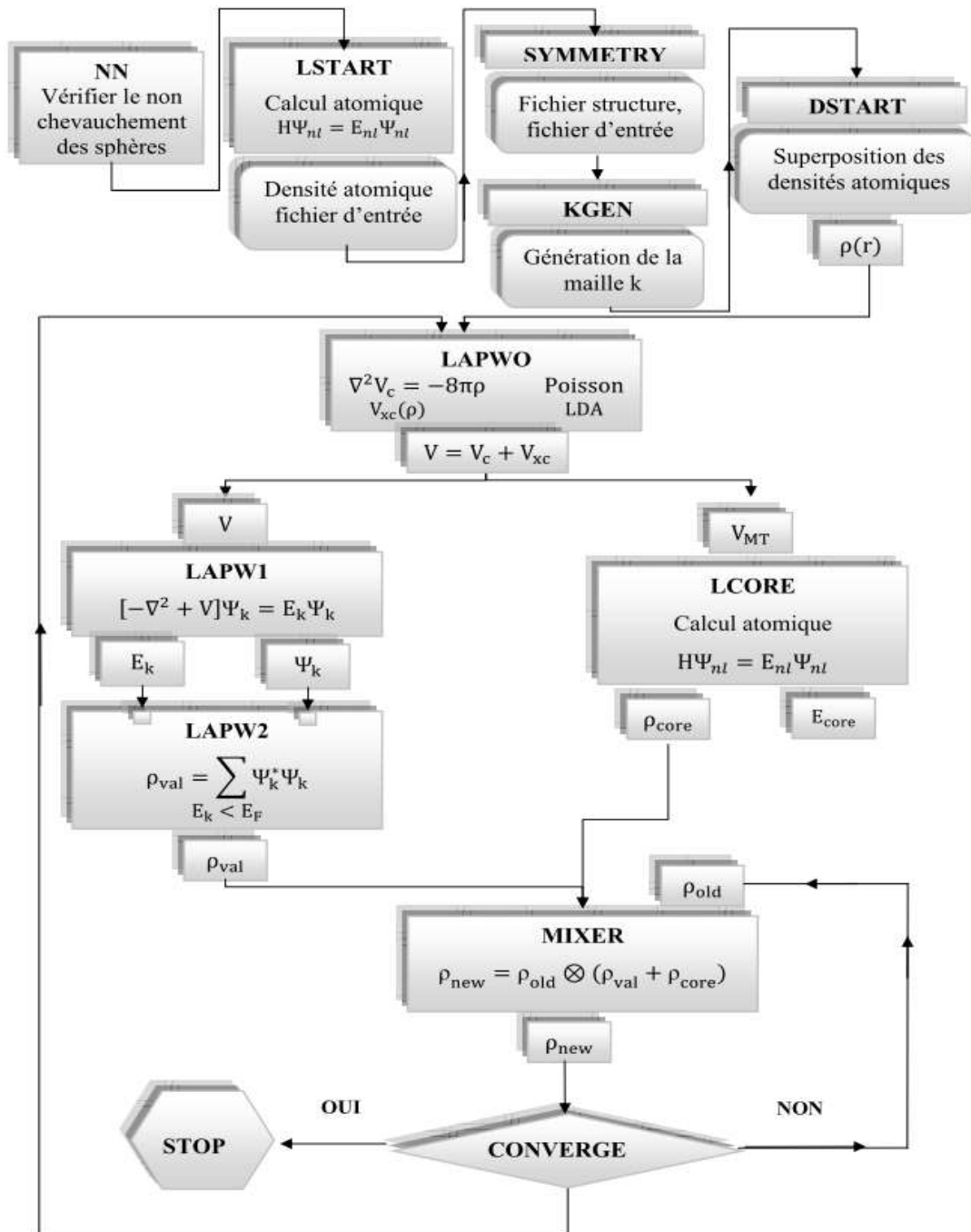


Figure III.3 : Le code Wien2k sous forme d'organigramme [45].

III.8 Bibliographies

- [1] F. Nogueira, M. A. L. Marques and C. Fiolhais, A Primer in Density Functional Theory, Springer Verlag, (2003).
- [2] P. K. Chattaraj, (Ed.), J. Chem. Sci. 117, 1 (2005).
- [3] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem, Annalen der Physik, 384(4):361–376, (1926).
- [4] Born, M., et Heisenberg, W., Zur Quantentheorie der Molekeln, dans Springer eBooks, (1985), p. 216-246.
- [5] Peter Ring and Peter Schuck, The nuclear many-body problem, Springer, (2004).
- [6] Fermi, E., Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente, The European Physical Journal A **48** (1928) 73-79.
- [7] Thomas, L. H., On the capture of electrons by moving electrified particles, Proceedings Of The Royal Society Of London Series A Containing Papers Of A Mathematical And Physical Character **114** (1927) 561-576.
- [8] Robert G Parr and Weitao Yang, "Density-functional theory of atoms and molecules, volume 16. Oxford university press, (1989).
- [9] Eberhard KU Gross and Reiner M Dreizler, Density functional theory, Springer, (1995).
- [10] R.G.Parr, Density functional theory, Annual Review of Physical Chemistry, 34 (1):631–656, (1983).
- [11] Ziegler, Tom., Approximate density functional theory as a practical tool in molecular energetics and dynamics, Chemical Reviews **91** (1991) 651-667.
- [12] Geerlings, P., De Proft, F., et Langenaeker, W., Conceptual Density Functional Theory, Chemical Reviews **103** (2003) 1793-1874.
- [13] Hohenberg, P., et Kohn, W., Inhomogeneous electron gas, Physical Review **136** (1964) B864-B871.
- [14] Richard M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, (April 2004).
- [15] Kohn, W., et Sham, L. J., Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Physical Review **140** (1965) A1133-A1138.
- [16] Mattsson, A. E., In Pursuit of the « Divine » Functional, Science **298** (2002) 759-760.
- [17] Ceperley, D. M., et Alder, B. J., Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, Physical Review Letters **45** (1980) 566-569.
- [18] Perdew, J. P., et Zunger, A., Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, Physical Review. B, Condensed Matter **23** (1981) 5048-5079.
- [19] W. Kohn, Reviews of Modern Physics, Vol. 71, No. 5, p 1253 (1999).
- [20] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., et al., Erratum : Atoms, molecules, solids, and surfaces : Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation, Physical Review. B, Condensed Matter **48** (1993) 4978.
- [21] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J.,

- et al., Atoms, molecules, solids, and surfaces : Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation, *Physical Review. B, Condensed Matter* **46** (1992) 6671-6687.
- [22] Perdew, J. P., Burke, K., et Ernzerhof, M., Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters* **77** (1996) 3865-3868.
- [23] Bloch, F. "Elektron im periodischen Potential, Bändermodell des Festkörpers, Z." *Phys* **52** (1928): 555.
- [24] Slater, J. C., et Phillips, J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids Vol. 4 : The Self-Consistent Field for Molecules and Solids, *Physics Today* **27** (1974) 49-50.
- [25] Herring, C., A New Method for Calculating Wave Functions in Crystals, *Physical Review* **57** (1940) 1169-1177.
- [26] Slater, J. C., Wave Functions in a Periodic Potential, *Physical Review* **51** (1937) 846-851.
- [27] O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- [28] Slater, J. C., Energy Band Calculations by the Augmented Plane Wave Method, dans *Advances in Quantum Chemistry*, 1964), p. 35-58.
- [29] T.L. Louks, The augmented plane wave method ,(Benjamin, New work) (1967).
- [30] D. Singh, Planes waves, pseudopotentials and the LAPW method, (1994).
- [31] Sjöstedt, E., Nordström, L., et Singh, D. J., An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method, *Solid State Communications* **114** (2000) 15-20.
- [32] Madsen, G. K. H., Blaha, P., Schwarz, K., Sjöstedt, E., et Nordström, L., Efficient linearization of the augmented plane-wave method, *Physical Review. B, Condensed Matter* **64** (2001).
- [33] Koelling, D. D., et Arbman, G. O., Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method : application to copper, *Journal Of Physics F Metal Physics* **5** (1975) 2041-2054.
- [34] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- [35] Singh, D. J., Adequacy of the local-spin-density approximation for Gd, *Physical Review. B, Condensed Matter* **44** (1991) 7451-7454.
- [36] Goedecker, S., et Maschke, K., Alternative approach to separable first-principles pseudopotentials, *Physical Review. B, Condensed Matter* **42** (1990) 8858-8863.
- [37] Singh, D., et Krakauer, H., H-point phonon in molybdenum : Superlinearized augmented-plane-wave calculations, *Physical Review. B, Condensed Matter* **43** (1991) 1441-1445.
- [38] Singh, D. J., Schwarz, K., et Blaha, P., Electric-field gradients in YBa₂Cu₃, *Physical Review. B, Condensed Matter* **46** (1992) 5849-5852.
- [39] Singh, D., Ground-state properties of lanthanum : Treatment of extended-core states, *Physical Review. B, Condensed Matter* **43** (1991) 6388-6392.
- [40] Roser Valentí . Introduction to the Density Functional Theory, Lecture notes presented in the "Institut for Theoretical Physics , university of Frankfurt, (2009).
- [41] Madsen, G. K. H., Blaha, P., Schwarz, K., Sjöstedt, E., et Nordström, L., Efficient linearization of the augmented plane-wave method, *Physical Review. B, Condensed Matter* **64** (2001).
- [42] E. Sjstedt, L.Nordstrm, D. J. Singh, An alternative way of linearizing the augmented

plane-wave method," Solid State Comm. 114, 15 (2000).

[43] Hamann, D. R., Semiconductor Charge Densities with Hard-Core and Soft-Core Pseudopotentials, Physical Review Letters **42** (1979) 662-665.

[44] Blaha, P., K. Schwarz, and J. Luitz. "WIEN97 User's Guide." Technical University Vienna, Vienna (1997).

[45] Schwarz, K., DFT calculations of solids with LAPW and WIEN2k, Journal Of Solid State Chemistry **176** (2003) 319-328.

[46] R. Dohmen, J. Pichlmeier , M. Petersen , F. Wagner et M. Scheffler, Computing in Science et Engineering, pp.18-28 (2001).

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, une étude par la méthode des éléments finis a été réalisée sur la géométrie d'un micro-actionneur électrothermique afin de prédire son déplacement sous l'application d'une tension avec deux matériaux différents. Le premier matériau est le polysilicium, qui sert de matériau de base, tandis que le second est un nouveau composé demi-Heusler que nous avons calculés ces propriétés structurales, élastiques, thermiques et thermoélectriques, pour ce but nous avons utilisé la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec la méthode des ondes planes augmentées ("FP-LAPW"). Nous avons utilisé le code "Wien2k" en utilisant l'approximation du gradient généralisé ("GGA-WC"). De plus, les codes Gibbs et Boltztrap ont été utilisés pour estimer les propriétés thermiques et de transport. Pour calculer la conductivité thermique du réseau du composé FeAsNb, nous avons exploité la formule de Slack.

IV.2 Première tentative pour la sélection du matériau idéal et détails de calculs

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra																
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Figure IV.1 : Choix des composés demi-Heusler X ($X=Co, Rh$ et Ir) $MnAs$.

Pour notre première tentative nous avons choisi trois composés tirés du tableau périodique (figure IV-1) :

Élément de transition **X**

Co : Cobalt

Rh : Rhodium

Ir : Iridium

Élément de transition Y

Mn : Manganèse

Elément Z du groupe V

As : Arsenic

Dans cette étape, le logiciel *Wien2k* est utilisé pour calculer la structure électronique des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs en phase cubique, dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité ("DFT"), en utilisant la méthode des ondes planes augmentées ("FP-LAPW") ou nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé ("GGA-WC") pour l'énergie d'échange et corrélation. Le nombre de k-points particuliers utilisés dans l'intégration irréductible de la zone de "Brillouin" est de 3000, et la valeur de la densité plane cut-off est $RK_{max} = 8$.

Comme nous avons déjà expliqué dans le chapitre II, la cristallisation des alliages demi Heusler XYZ est dans la structure $C1_b$ en phase cubique, avec ou les atomes X occupent les sites 4a (0.25, 0.25, 0.25), l'atome Y occupe le site 4b (0.5, 0.5, 0.5) et l'atome Z occupe le site 4c (0, 0, 0) en coordonnées de Wyckoff (figure IV-2) [1].

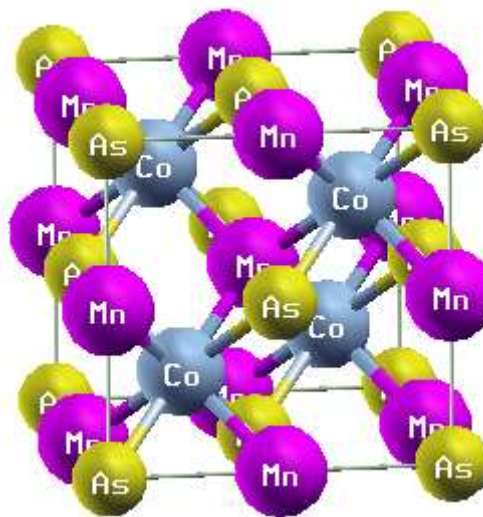


Figure IV.2 : Structure de composés demi-Heusler CoMnAs.

IV.2.1 Propriétés structurales

L'investigation des propriétés structurales des composés matériaux étudiés revêt une importance primordiale pour déterminer les paramètres de structure des matériaux à l'équilibre statique, tels que la taille de maille a_0 , le module de compression B , et sa dérivée B' . En utilisant les énergies à l'état d'équilibre, cette analyse nous permet d'identifier la phase la plus stable de nos composés. La détermination de ces paramètres nous donne ensuite accès à d'autres propriétés, telles que les propriétés électroniques, élastiques, etc....

Rappelons que nos calculs sont réalisés en utilisant la méthode "FP-LAPW" avec l'approximation "GGA-WC". Les propriétés structurales sont obtenues en ajustant la courbe d'énergie totale en fonction du volume à l'aide de l'équation de "Murnaghan" :

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

Où E_0 , B et V_0 sont : l'énergie totale, le module de compression et le volume à l'état d'équilibre.

Le module de compression est déterminé en trouvant le minimum de la courbe d'énergie totale en fonction du volume, utilisant la relation suivante :

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

IV.2.1.a La stabilité et l'état d'équilibre structurel

Nous avons réalisé un calcul auto-cohérent pour déterminer l'énergie totale de nos composés ternaires MnAs avec les éléments X (X = Co, Rh et Ir) dans différentes phases magnétiques.

Il est largement reconnu que les propriétés des composés à base de métaux de transition sont étroitement liées à leur structure électronique [2].

Dans l'état d'équilibre, nous avons étudié la variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille pour les deux phases : la phase non magnétique ("NM") et la phase ferromagnétique ("FM"), qui sont classifiées dans le groupe d'espace (216_F43m). Afin de mettre en évidence l'énergie la plus basse, nous avons tracé sur un même graphique l'évolution de l'énergie totale en fonction du volume de la maille pour les phases NM et FM (Figure IV-3). Cela nous permet de visualiser clairement les différences d'énergie entre ces deux phases. Les figures illustrent clairement que la structure la plus stable pour les trois matériaux étudiés correspond à la phase ferromagnétique de la structure X (X=Co, Rh et Ir) MnAs, avec un groupe d'espace 216_F43m.

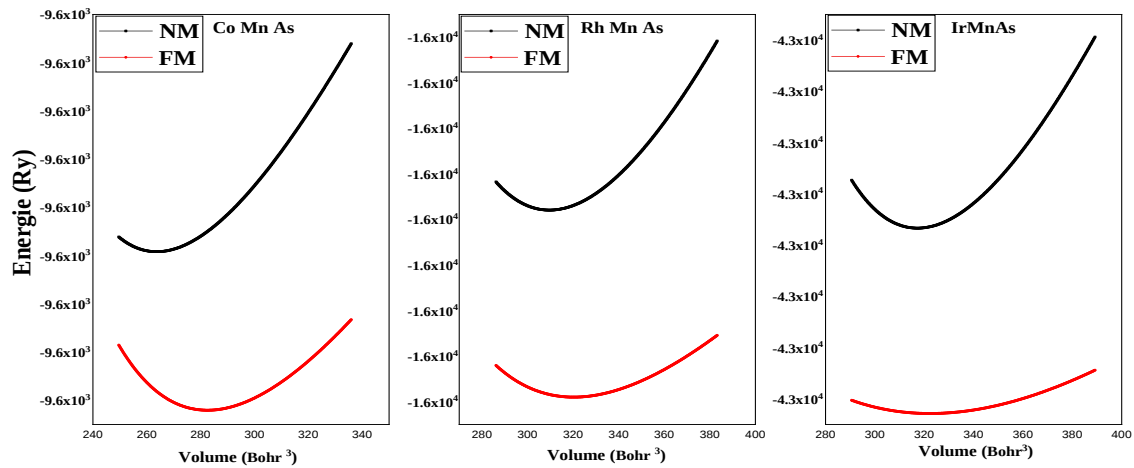


Figure IV.3 : L'énergie totale des composés X ($X=\text{Co}, \text{Rh}$ et Ir) MnAs pour tous les types de structures.

Le tableau IV.1 représente la constante de réseau a_0 , le module de compression B et ça dérivé B' des demi- Heuslers X ($X=\text{Co}, \text{Rh}$ et Ir) MnAs de la structure la plus stable.

Tableau IV-1 : Propriétés d'état fondamental des semi- Heusler X ($X=\text{Co}, \text{Rh}$ et Ir) MnAs.

	Constante de réseau $a_0(\text{\AA})$			Module de compression B (GPa)		La dérivée de B' (GPa)	
	Notre travail	Exp	Autre calcul	Notre travail	Autre calcul	Notre travail	Autre calcul
CoMnAs	5.468	-	-	167.279	-	5.470	-
RhMnAs	5.768	-	-	162.842	-	6.456	-
IrMnAs	5.810	-	-	179.849	-	5.239	-

IV.2.2 Propriétés mécaniques

L'objectif de l'étude du comportement mécanique des matériaux est de comprendre leur réaction sous une charge spécifique. En physique, l'élasticité désigne la capacité d'un matériau solide à retrouver sa forme initiale après avoir été déformé. La déformation élastique se réfère à une déformation qui peut être inversée, c'est-à-dire que le matériau retrouve sa forme d'origine une fois que la contrainte qui lui est appliquée est relâchée. Les mécanismes physiques responsables du comportement élastique varient d'un matériau à un autre. Dans le cas des métaux, lorsque des forces sont appliquées, la structure atomique du réseau subit des changements de taille et de forme. Lorsque les forces sont relâchées, le matériau revient à son état initial, où l'énergie est minimale [3,4].

L'élasticité joue un rôle essentiel en établissant une relation entre les déformations subies par un matériau et les contraintes qui lui sont appliquées. Cette relation exige que les déformations soient réversibles et linéairement proportionnelles aux forces exercées. Les coefficients de proportionnalité associés nous fournissent les paramètres constantes élastiques, qui sont l'un des principaux objectifs de ce chapitre. Le calcul des constantes élastiques revêt une importance particulière car il permet de déterminer les propriétés élastiques d'un matériau, telles que le facteur de "Zener", la pression de "Cauchy", le module de "Young", le coefficient de "Poisson" et le module de compressibilité isotrope. Ces grandeurs fournissent des informations précieuses sur les forces entre les atomes ou les ions constituant un solide, ce qui est essentiel pour interpréter et comprendre la nature des liaisons dans l'état solide.

IV.2.2.a Propriétés élastiques des matériaux

Pour notre cas, nous avons calculés les constants élastiques par l'application 'stress-strain' intégrée dans le code *Wien2k*, le tableau IV.2 offre les valeurs calculées des coefficients élastiques pour nos trois composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

Tableau IV-2: Constantes élastiques calculées des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

Coefficients d'élasticités	CoMnAs	RhMnAs	IrMnAs
C_{11} (GPa)	164.4	262.2	195.6
C_{12} (GPa)	126.4	76.2	122.2
C_{44} (GPa)	72.3	71.6	74.5

D'après le critère de Born-Huang relatives à la stabilité mécanique, les constants élastiques rassemblés dans le tableau IV.2 montrent que ces alliages sont élastiquement stables. Aucune donnée expérimentale concernant les propriétés élastiques des matériaux X (X=Co, Rh et Ir) MnAs n'a été trouvée dans notre étude, Les résultats obtenus dans cette étude fournissent une approche prédictive pour ce type de matériaux. Cependant pour décrire le comportement mécanique de ces matériaux en se basant sur les constantes C_{ij} , les grandeurs élastiques telles que le module de cisaillement G , le module de Young E et le rapport de poisson ν sont évalués en utilisant l'approximation de Voigt-Reuss-Hill [4,5] à la pression $P = 0$ où les indices R et V pour le module de compressibilité et le module de cisaillement sont relatifs aux approximations de Voigt et de Reuss, respectivement. Pour les systèmes cubiques, ces grandeurs élastiques sont calculées en utilisant les expressions suivantes :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (IV-3)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2}, G_V = \frac{(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})}{5}, G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (IV-4)$$

$$E = \frac{9BG}{(3B + G)} \text{ et } \nu = \frac{3B - E}{6B} \quad (IV-5)$$

Les résultats obtenus pour nos composés sont résumés dans le Tableau IV.4, où l'on remarque l'absence de valeurs théoriques préexistantes dans la littérature. Le module de compressibilité B fournit des informations sur la dureté du matériau ; Plus la valeur de B est grande, plus le matériau n'est dur. Nos valeurs obtenues du module de compressibilité pour ces composés demi-Heuslers sont grandes ($B > 30$ GPa) ce qui implique que ces alliages ont une faible compressibilité [6], et par conséquent, ces alliages peuvent être classés comme relativement durs et capables de résister aux variations de volume et de forme sous les conditions ambiantes. Cependant, le module de cisaillement G suggère une endurance à la déformation plastique. Nous remarquons que le module de cisaillement des alliages considérés est beaucoup plus faible que le module de compressibilité, ce qui indique que ces alliages ont plus de résistance à la compression du volume qu'au changement de forme.

Selon le rapport de Pugh (" B/G ") [6], on peut distinguer la fragilité et la ductilité d'un matériau, Ainsi, si le rapport " B/G " est supérieur à 1.75, le matériau est considéré comme ductile, tandis que s'il est inférieur à 1.75, le matériau est considéré comme dur et fragile. Suivant le tableau IV.4 les valeurs de ce rapport sont supérieures à 1.75 pour tous les composés, ce qui montre la ductilité des alliages étudiés. Une autre manière de déterminer la fragilité ou la ductilité d'un alliage est d'examiner le coefficient de "Poisson". Généralement, ce coefficient est supérieur ou égal à 1/3 pour les matériaux ductiles, tandis qu'il est inférieur à cette valeur pour les matériaux fragiles. Nos composés demi-Heusler la valeur de ν est également supérieur à 1/3 ce qui confirme ce que nous avons dit avant, que ces composés sont ductiles.

Le module de Young E caractérise la rigidité d'un matériau. Lorsque le module de Young est plus élevé pour un matériau donné, celui-ci est plus rigide. Les valeurs obtenues de E sont plus au moins élevées ce qui démontre la caractéristique rigide de nos alliages étudiés.

Nous avons aussi calculé la dureté de ces alliages car c'est une propriété mécanique qui nous renseigne sur la plasticité, l'élasticité et la résistance des matériaux. Il existe plusieurs modèles de calcul de la dureté dans la littérature. Dans notre étude, le modèle de la micro-dureté de Vickers a été adopté en utilisant l'expression suivante :

$$H_v = 0.92 \cdot \left(\frac{G}{B} \right)^{1.137} \cdot G^{0.703} \quad (\text{IV-6})$$

Les valeurs de la dureté de nos alliages sont faibles, ceci est prouvé par les valeurs élevées de G/B et de G , car une dureté élevée est associée à un G/B et un G élevés. Nous concluons donc que les matériaux étudiés ont un caractère moins dur ce qui implique que ces alliages ne supportent pas des grandes charges et ne pourront pas travailler dans des dispositifs de grandes échelles, et que ce sont des matériaux pour les petites pièces électroniques ou mécaniques.

L'obtention des constantes élastiques nous a également permis de déduire d'autres grandeurs mécaniques, telles que l'anisotropie et le coefficient de Cauchy, à partir d'une estimation précise de la masse volumique de chaque composé.

Il est nécessaire de connaître tout d'abord le comportement isotrope ou bien anisotrope du matériau, pour cela il faut calculer le facteur d'anisotropie de "Zener" qui estime le degré d'anisotropie des solides. On dit qu'un matériau totalement isotrope si $A=1$, tandis que toute valeur inférieure ou supérieure à «1» indique l'anisotropie du matériau. L'anisotropie peut être déterminée à l'aide de la relation [4,5] :

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (\text{IV-7})$$

La détermination de la pression de Cauchy CP permet d'évaluer la nature de la liaison atomique dans les métaux et les composés, qu'ils soient fragiles ou ductiles [6] :

$$CP = C_{12} - C_{44} \quad (\text{IV-8})$$

Les résultats pour l'anisotropie A , le coefficient de Cauchy CP , et la masse volumique ρ sont énumérés dans le Tableau IV.3.

Tableau IV-3 : anisotropie A , coefficients de Cauchy CP et masse volumique ρ en Kg/m^3 obtenus.

Matériaux	Références	A	CP	ρ
CoMnAs	Calculés	3.8	54.1	5551.31
	Autres	-	-	-
RhMnAs	Calculés	0.77	4.6	6041.4
	Autres	-	-	-
IrMnAs	Calculés	2.03	47.7	8179.7
	Autres	-	-	-

Dans nos composés le facteur de Zener d'anisotropie A est différent de 1 dans les trois composés, implique que les composés sont anisotropes. Nous connaissons aussi que lorsque

A_{11} indique la rigidité maximale le long de la diagonale du cube $\langle 111 \rangle$ ce qui est le cas des deux composés CoMnAs et IrMnAs, tandis que pour A_{11} , il indique la même chose le long des axes du cube $\langle 100 \rangle$ et c'est le cas de composé RhMnAs.

Pour nos alliages, la valeur de la pression de "Cauchy" est positive ce qui implique le caractère métallique ductile de ces composés.

L'étude des propriétés élastiques des surfaces tridimensionnelles (3D), confirme clairement le comportement d'anisotropie des modules mécaniques.

Pour la structure cubique, la dépendance de la direction cristallographique du module de compressibilité " B " le module de Young " E " et le module de cisaillement " G " est calculée en utilisant les expressions suivantes :

$$\frac{1}{B} = (S_{11} + 2S_{12})(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2) \quad (IV-9)$$

$$\frac{1}{E} = S_{11} - 2(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2) \quad (IV-10)$$

$$\frac{1}{G} = S_{44} - 4(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44})(\sin^2 \theta \cos^2 \theta + 0.125 \sin^4 \theta)(1 - \cos 4\varphi) \quad (IV-11)$$

Les S_{ij} sont le contenu de la matrice des constantes de conformité élastique, qui sont obtenues à partir de l'inverse de la matrice des constantes élastiques ($S_{ij} = C_{ij}^{-1}$), et l_1, l_2, l_3 sont les cosinus directeurs selon les axes x, y et z. La forme sphérique parfaite de la dépendance directionnelle 3D est associée au caractère isotrope du matériau, tandis que la forme non sphérique reflète l'anisotropie. Les surfaces 3D avec leurs projections bidimensionnelles (2D) des différents plans [100], [010] et [001] des modules de compressibilité, de Young et de cisaillement, pour les composés semi-Heusler X (X=Co, Rh et Ir) MnAs sont illustrés sur les figures IV- 4, 5 et 6, respectivement. De la figure IV-4, le module de compressibilité présente une forme sphérique parfaite (3D), ce qui indique qu'il présente un comportement isotrope pour les alliages étudiés. On peut noter dans les figures IV- 5 et 6 un écart important par rapport à la forme de sphère pour le module de cisaillement et le module de Young, révélant que le module de cisaillement montre un degré d'anisotropie important.

Les projections 2D des modules de compressibilité " B " de Young " E " et de cisaillement " G " sur les plans (100), (010) et (001) présentent un caractère isotrope pour B et un grand comportement anisotrope pour E que pour G .

Les valeurs de la pression de Cauchy sont positives ce qui implique le caractère métallique de nature ductile des composés semi-Heusler X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

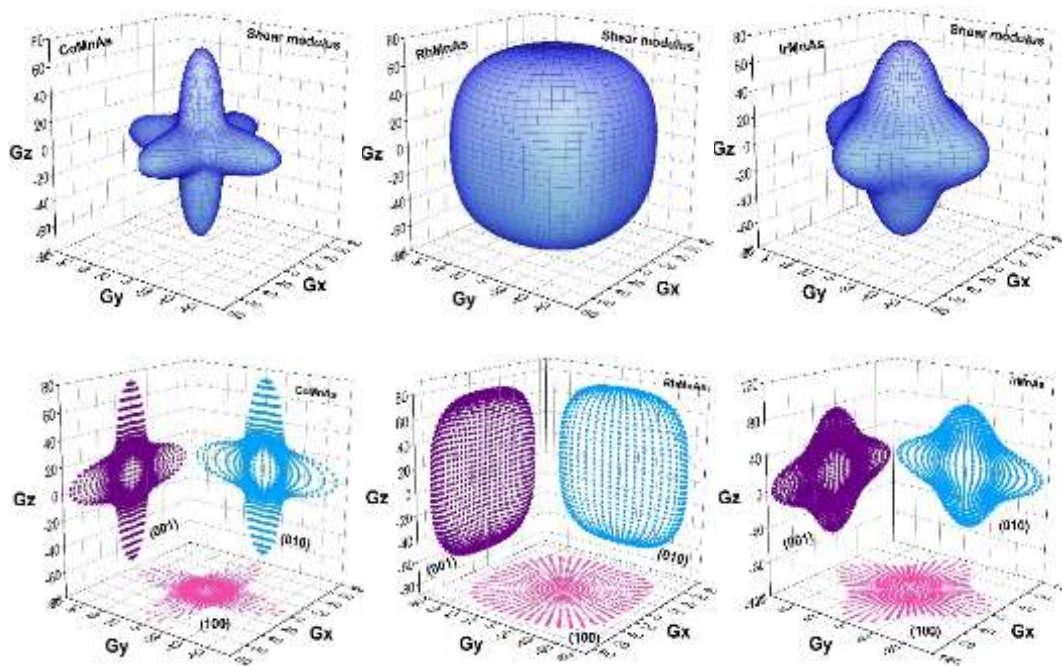


Figure IV.4 : Illustration 3D du module de compressibilité et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

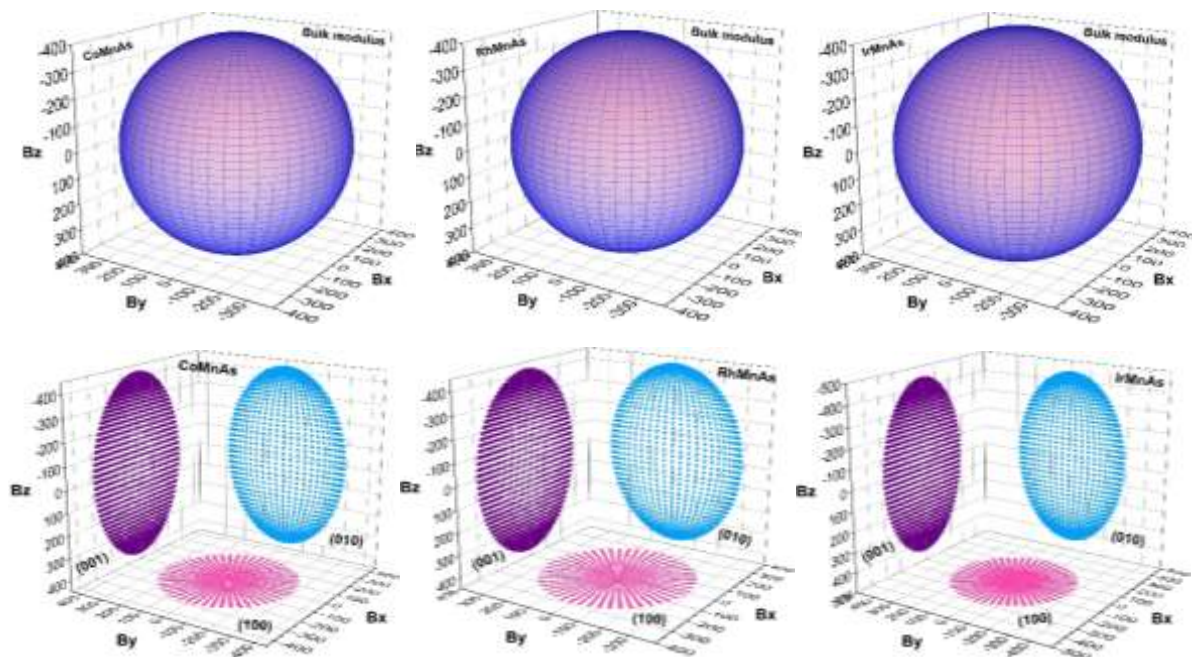


Figure IV.5 : Surface 3D du module de cisaillement et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

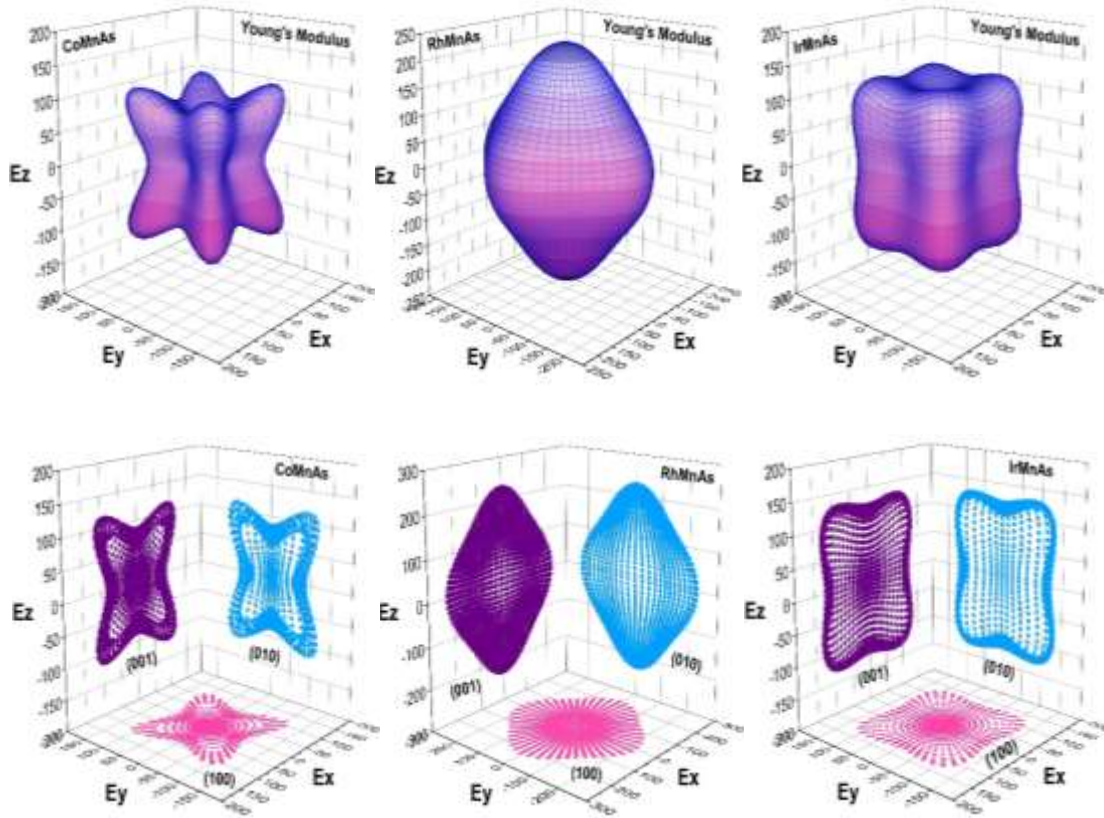


Figure IV.6 : Surface 3D du module de Young et projections de la surface 3D sur les plans (100), (010) et (001), pour les composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

IV.2.2.b Température de Debye et température de fusion

La température de Debye joue un rôle fondamental et est étroitement liée à diverses propriétés physiques telles que la capacité thermique, la conductivité thermique et la température de fusion. Ces grandeurs sont liées aux valeurs du module d'élasticité volumique (module de rigidité) et du module de cisaillement. À des températures basses, seules les excitations vibratoires liées aux vibrations acoustiques contribuent. Une méthode couramment utilisée pour calculer la température de Debye à partir des constantes élastiques consiste à utiliser la relation qui relie la vitesse moyenne des ondes élastiques V_m et θ_D [7] :

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{\frac{1}{3}} V_m \quad (\text{IV-12})$$

Avec N_A le nombre d'Avogadro ; M la masse molaire ; ρ la masse volumique ; h la constante de Planck et k_B la constante de Boltzmann. V_m la vitesse moyenne de son donner par [7] :

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_t^3} + \frac{1}{V_l^3} \right) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (\text{IV-13})$$

$$\text{Dont : } V_l = \left(\frac{3B + 4G}{3\rho} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad V_t = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Représentent vitesse de propagation du son Longitudinale, et la vitesse de propagation du son Transversale respectivement.

Nous avons également utilisé les constants élastiques pour calculer la température de fusion en utilisant l'équation suivante

$$T_m (K) = [553 + (5.911)C_{12}] \pm 300 \quad (\text{IV-14})$$

Tableau IV-4 : Module de compression (B) GPa, Module de cisaillement (G) GPa, Module de Young (E) GPa, Coefficient de poisson (ν), le rapport B/G , la Micro dureté (H), Température de Debye (θ_D) en K, Température de Fusion (T_m) en °K.

Matériaux	B	G	E	ν	B/G	H	θ_D	$T_m \pm 300$
CoMnAs	139.06	42.52	115.76	0.36	3.27	3.33	244.81	1300.15
RhMnAs	138.2	63.08	164.25	0.30	2.19	6.94	314.66	1003.41
IrMnAs	146.67	56.07	149.19	0.33	2.61	5.14	315.46	1275.32

IV.2.3 Propriétés thermiques

La connaissance des propriétés thermiques est essentielle dans pratiquement toutes les industries et secteurs d'activité : génie des procédés des matériaux, production d'énergie électrique, sidérurgie, métallurgie, génie climatique et bâtiment, mécanique, aérospatial et aéronautique etc...

Au début du XXe siècle, deux modèles ont été formulés pour Clarifier le comportement de la capacité calorifique des solides en fonction de la température en se concentrant sur les vibrations du réseau cristallin. Ces modèles, connus sous le nom de modèle d'Einstein et modèle de Debye, ont été développés respectivement en 1907 et 1912. Le modèle " d'Einstein" repose sur deux hypothèses fondamentales [8] :

- chaque atome du réseau cristallin agit comme un oscillateur harmonique quantique tridimensionnel
- tous les atomes ont la même fréquence de vibration

Cette dernière hypothèse permet au modèle de Debye d'être plus précis, en particulier à basse température, où les résultats expérimentaux montrent des écarts avec le modèle d'Einstein. Cependant, à des températures élevées, les deux modèles sont en accord avec la loi de "Dulong et Petit", qui prédit la capacité calorifique des solides.

Pour nos composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs, les propriétés thermiques ont été évaluées en utilisant le modèle quasi harmonique de "Debye" [9,10], cette approximation, mise en œuvre dans le code "Gibbs" compatible avec le code *Wien2k*.

Ce code a l'avantage d'afficher plusieurs paramètres thermodynamiques à différentes température et pression, tels que les capacités calorifiques, la température de Debye, le coefficient de dilatation thermique, l'entropie, l'enthalpie de formation...etc.

Les grandeurs thermiques des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs ont été calculées en utilisant le modèle quasi harmonique de Debye. Ces calculs ont été effectués en utilisant les données d'entrée du programme de Gibbs, notamment l'énergie totale "E" et le volume "V" de la cellule primitive, en fonction de la pression et de la température [11].

La capacité calorifique à pression constante C_p , La capacité calorifique à volume constant

C_v , le coefficient de dilatation thermique α et l'enthalpie de Gibbs sont déterminées et représentées dans la gamme de température $T= 0 \text{ °K}$ à $T= 450 \text{ °K}$, et de pression varie entre $P = 0 \text{ GPa}$ à $P = 35 \text{ GPa}$.

Citant les paramètres de modèle de Debye qui sont ciblés dans notre travail respectivement la température, la capacité calorifique et le coefficient de dilatation thermique [10,11] :

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k} \left[6\pi^2 V^{\frac{1}{3}} n \right]^{\frac{1}{3}} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}} \quad (\text{IV-15})$$

$$C_v = 3nk_B \left[4D\left(\frac{\theta}{T}\right) - \frac{\frac{3\theta}{T}}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right] \quad (\text{IV-16})$$

$$\alpha = \frac{\gamma C_v}{B_T V} \quad (\text{IV-17})$$

IV.2.3.a Coefficient de dilatation thermique

Le coefficient de dilatation quantifie la variation relative du volume d'un système lorsque l'on modifie un seul paramètre, généralement la pression ou la température. Il représente l'expansion

ou la contraction du système en réponse à ces variations [12]. Ce coefficient α a été prédit dans la figure IV-7, Cette figure met en évidence la similarité du comportement des trois matériaux en termes de coefficient de dilatation thermique en fonction de la température et de la pression. On observe une augmentation de la valeur de α avec l'augmentation de la température. À une température donnée, on observe une diminution significative du coefficient de dilatation thermique avec l'accroissement de la pression. L'accroissement de la pression affaiblit l'augmentation de α en fonction de la température, comme le montre clairement la figure précédemment mentionnée. De plus, on remarque que le composé CoMnAs présente la valeur la plus élevée par rapport aux autres composés pour une température et une pression données. A $T = 300$ K et $P = 0$ GPa, le coefficient de dilatation thermique est égal à $3.2805 (10^{-5} \text{ }^\circ\text{K})$, $2.5559 (10^{-5} \text{ }^\circ\text{K})$, $2.858 (10^{-5} \text{ }^\circ\text{K})$ pour les composés CoMnAs, RhMnAs, IrMnAs respectivement.

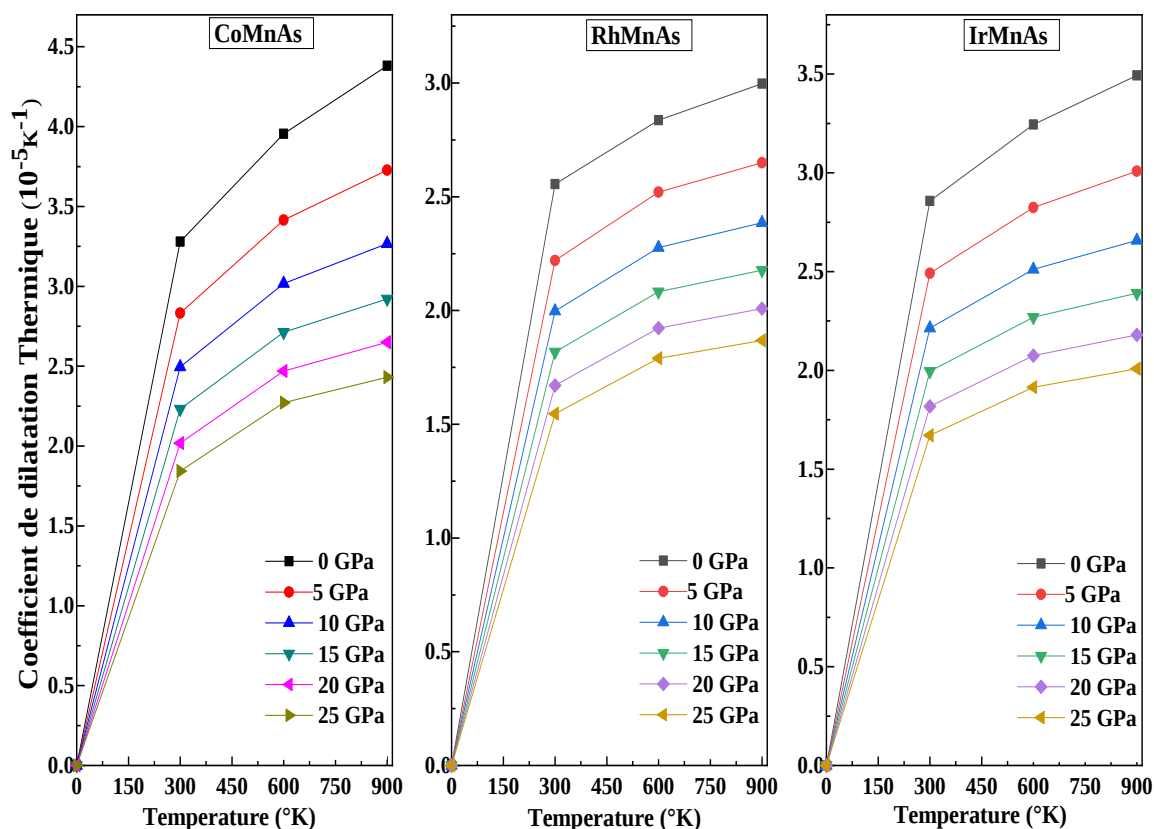


Figure IV.7 : Coefficient de dilatation thermique en fonction de la température à différentes pressions pour les composés XMnAs ($X=\text{Co, Rh et Ir}$).

IV.2.3.b Capacité calorifique

La variation de la capacité calorifique à pression constante C_p en fonction de la température à différentes pressions est illustrée dans la figure IV-8. Les résultats indiquent que pour les trois demi-Heusler, les courbes se chevauchent presque, ce qui valide que l'augmentation de la pression n'a pas d'impact sur la valeur de C_p . La capacité calorifique à pression constante augmente de manière continue avec l'augmentation de la température et se stabilise vers une valeur constante. Nous pouvons donc faire l'hypothèse que la capacité calorifique reste constante à des températures élevées, et nous prendrons en compte cette hypothèse pour le calcul des propriétés thermoélectriques dans la prochaine partie.

La capacité calorifique C_v est une mesure de la capacité d'un matériau à stocker de la chaleur. La figure IV-9 illustre la variation de la capacité calorifique C_v en fonction de la température dans la plage de pression de 0 à 25 GPa. L'anharmonicité entraîne une dépendance de C_v vis-à-vis de la température et de la pression pour des températures inférieures à 450 K. Au-dessus d'une certaine température, la capacité calorifique C_v présente un plateau horizontal, et les variations entre les capacités thermiques à différentes pressions deviennent de moins en moins prononcées à mesure que la température augmente. Le C_v décroît avec l'augmentation de la pression et augmente avec l'augmentation de la température, ce qui suggère que la température et la pression ont des effets opposés sur le C_v . De plus, l'effet de la température sur le C_v est plus significatif que celui de la pression. Les valeurs de C_p et C_v des trois composés sont comparables en termes d'ordre de grandeur. Il convient de souligner que ces valeurs sont purement prédictives, étant donné que nous ne disposons d'aucune donnée expérimentale pour les confirmer.

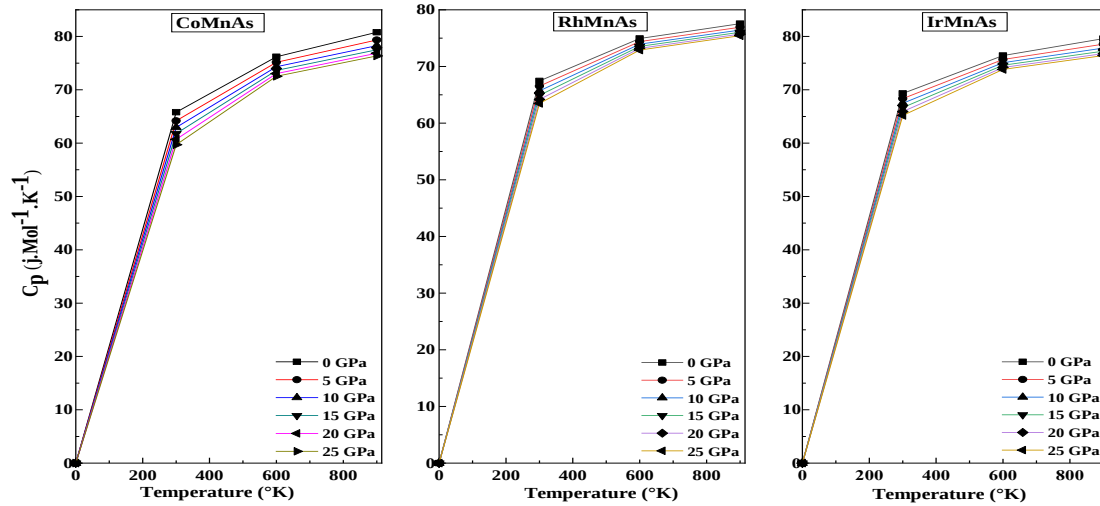


Figure IV.8 : Capacité calorifique C_p en fonction de la température à différentes pressions pour les composés $XMnAs$ ($X=Co, Rh$ et Ir).

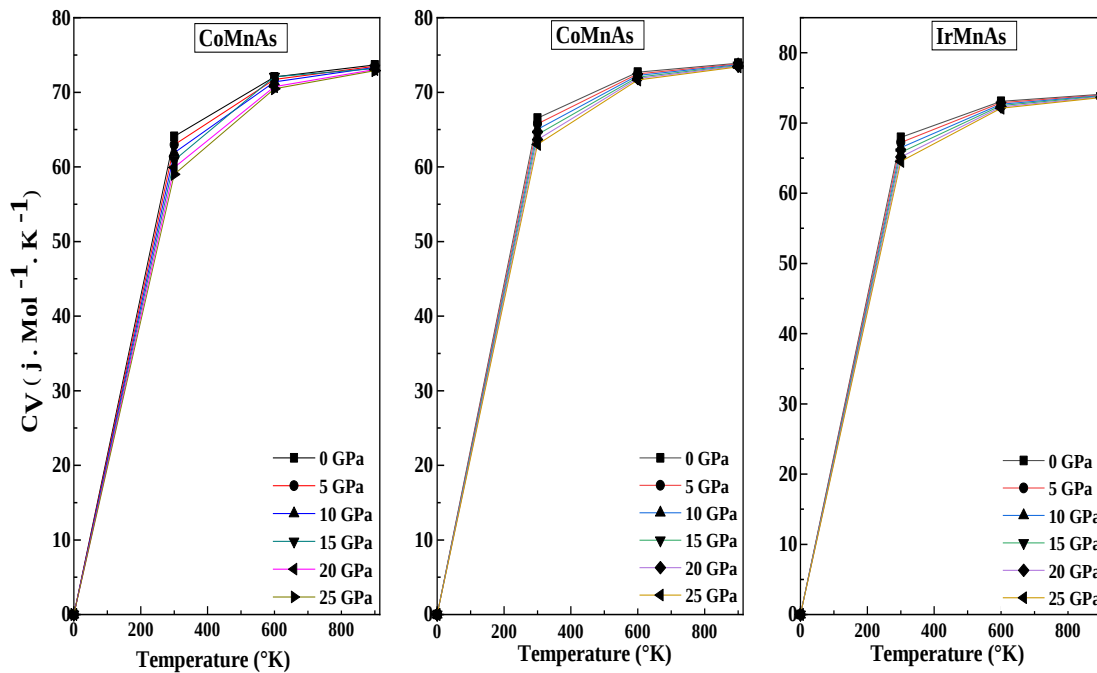


Figure IV.9 : Capacité calorifique C_v en fonction de la température à différentes pressions pour les composés $XMnAs$ ($X=Co, Rh$ et Ir).

IV.2.4 Propriétés de Transports

Les propriétés thermoélectriques ont été étudiées en utilisant la théorie semi-classique de Boltzmann, spécifiquement dans l'approximation du temps de diffusion constant. Cette approche a été mise en œuvre en utilisant le code BoltzTraP [52].

Afin de déterminer les propriétés de transport, telles que la conductivité électrique, le coefficient de Seebeck et la conductivité thermique électronique, des calculs spécifiques ont été

effectués. Les structures de bande d'énergie calculée sont fournies en tant que données d'entrée dans le package BoltzTraP. Le code BoltzTraP est largement utilisé pour résoudre et simuler l'équation de transport de "Boltzmann". L'un de ses avantages est qu'il permet d'afficher tous les coefficients de transport électronique en fonction du potentiel chimique à différentes températures, c'est-à-dire les densités des porteurs de charges ; il suppose un temps de relaxation τ indépendant de l'énergie et ne considère pas la contribution des phonons, par exemple, à la conductivité thermique k .

Pour cette partie nous avons exploité la structure de bande calculée par l'approximation WC-GGA, pour calculer les propriétés thermoélectriques des composés X (X=Co, Rh et Ir) MnAs. Dans la théorie du transport semi-classique, et comme nous avons déjà illustrés quelques paramètres de transports dans le chapitre I. On exprimera maintenant le coefficient de Seebeck, la conductivité électrique et les tenseurs de transport électronique de la conductivité thermique comme suit [53] :

$$S_{\alpha\beta}(T, \mu) = \frac{1}{eT\sigma_{\alpha\beta}(T, \mu)} \int \sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) \cdot (\epsilon - \mu)^2 \left[-\frac{\partial f_0(T, \epsilon, \mu)}{\partial \epsilon} \right] d\epsilon \quad (\text{IV-18})$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) \left[-\frac{\partial f_0(T, \epsilon, \mu)}{\partial \epsilon} \right] d\epsilon \quad (\text{IV-19})$$

$$k_{\alpha\beta}^0(T, \mu) = \frac{1}{e^2 T \Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) \cdot (\epsilon - \mu)^2 \left[-\frac{\partial f_0(T, \epsilon, \mu)}{\partial \epsilon} \right] d\epsilon \quad (\text{IV-20})$$

Dont : e charge d'électron, Ω volume d'espace réciproque, ϵ énergie porteuse, f fonction de distribution de Fermi, μ potentiel chimique, T température absolue.

Le tenseur de conductivité $\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$ en fonction de l'énergie et la conductivité thermique électronique k s'exprime comme :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{i,k} \sigma_{\alpha\beta}(i, k) \frac{\delta(\epsilon - \epsilon_{i,k})}{d\epsilon} \quad (\text{IV-21})$$

Où N est le nombre de k-points.

Nos calculs ont été réalisés en utilisant une approximation constante pour le temps de relaxation de 8 fs, c-à-d $\tau = 0.8 \times 10^{-14}$ s comme imposé dans le guide d'utilisation de BoltzTraP.

IV.2.4.a Coefficient de Seebeck

Dans le domaine des matériaux semi-conducteurs, il est largement reconnu que dans un semi-conducteur de type p, les trous sont les porteurs de charge majoritaires, tandis que les électrons sont les porteurs de charge minoritaires. Dans la figure IV-10 nous avons représentés le

changement de coefficient de Seebeck en fonction de potentiel chimique qui varie entre $\mu - E_F = \pm 2eV$ (considéré comme la concentration des porteurs de charges pour les alliages) à différentes températures (300, 600 et 900 °K) pour nos composés semi-Heusler X (X=Co, Rh et Ir) MnAs.

La caractéristique négative du coefficient de Seebeck (S) indique une conduction de type n, où les électrons sont les principaux porteurs de charge. Le signe positif du coefficient de Seebeck (S) indique une conduction de type p, où les trous sont les porteurs majoritaires.

Dans les trois composés, les valeurs optimales du coefficient de Seebeck (S) se situent autour de l'énergie de Fermi (E_F). Cela est dû au fait que S est inversement proportionnel à la conductivité électrique, et dans cette région, la conduction est intrinsèque, ce qui se traduit par une faible conductivité. Ces valeurs optimales diminuent à mesure que la température augmente.

De plus on remarque que pour les composés CoMnAs et RhMnAs lorsque $\mu = E_F$ la valeur de S est positive montre que la conduction est de type P, donc ces composés semi-Heusler sont des semi-conducteurs de type p, par contre le composé IrMnAs sa valeur de S est négative dans le niveau $\mu = E_F$, ce qui implique le type n de la conduction, donc ce composé est un semi-conducteur de type n.

On voit bien sur la figure que les pics de composé CoMnAs sont très importantes par rapport aux pics des autres composés, dont on observe les pics faibles de composé IrMnAs.

Pour le composé CoMnAs la valeur de S est négligeable à partir de l'intervalle de potentiel chimique $[-0.44, -1]$, au proximité du niveau de Fermi les deux pics apparaissent et prennent les valeurs maximales vers des niveaux de potentiel chimique supérieur, l'un des pics dans la région n et l'autre dans la région p. A $T = 300^\circ K$ la valeur absolue maximale de S est de 0.0020135242 ($V / ^\circ K$) lorsque $\mu - E_F = 0.13518$ eV pour le type p, et pour le type n, S prend la valeur de 0.0020112573 ($V / ^\circ K$) lorsque $\mu - E_F = 0.25758$ eV.

Pour le composé RhMnAs les pics de S commencent qu'après la valeur de potentiel chimique égale à 0.078621 eV, A $T = 300^\circ K$ la valeur absolue maximale de S est de 0.00147337 ($V / ^\circ K$) lorsque $\mu - E_F = 0.472555$ eV pour le type p, et pour le type n, S prend la valeur de 0.0015059 ($V / ^\circ K$) lorsque $\mu - E_F = 0.585405$ eV.

Le composé IrMnAs ces valeurs de S se révèle plus faible par rapport aux composés précédents, les pics commencent avant $\mu = E_F$, bien précisément $\mu - E_F = -0.2499$ eV. A $T = 300^\circ K$ la valeur absolue maximale de S est de $5.76785 \cdot 10^{-4}$ ($V / ^\circ K$) lorsque $\mu - E_F = -0.129828$ eV

pour le type p, et pour le type n, S prend la valeur de $3.04423 \text{ (V/}^\circ\text{K)}$ lorsque $\mu - E_F = -0.0428456 \text{ eV}$.

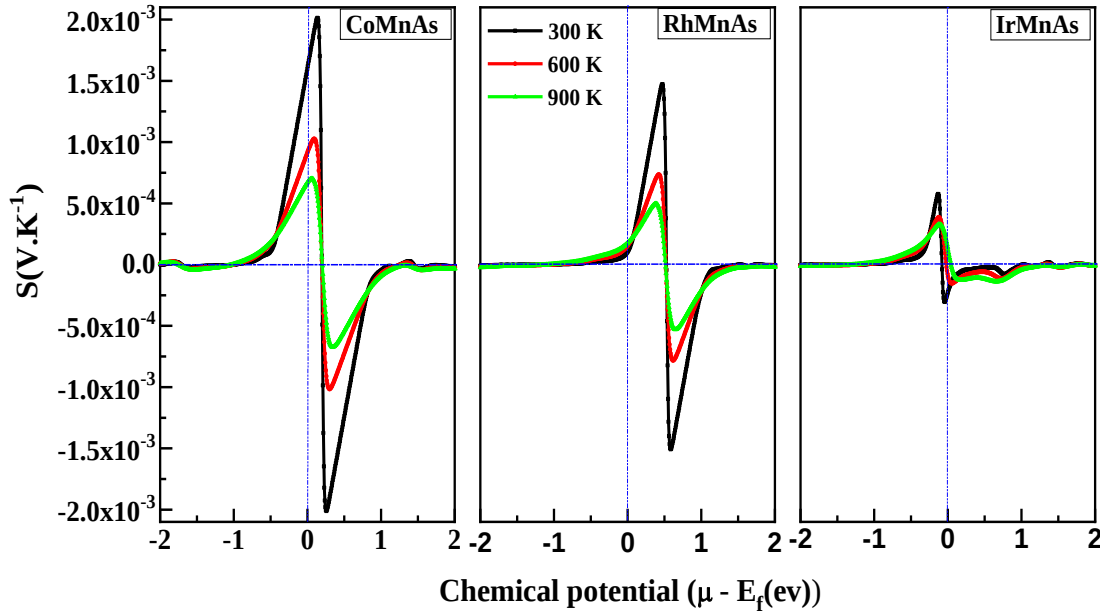


Figure IV.10 : Le coefficient de Seebeck S en fonction du μ .

IV.2.4.b Conductivité électrique et conductivité thermique électronique

La figure IV-11 présente l'évolution de la conductivité électrique en fonction de potentiel chimique $\mu - E_F = \pm 2 \text{ eV}$ à différente température (300°K , 600°K et 900°K), cette courbe met en évidence le fait que l'effet de la température sur la conductivité électrique des trois composés est négligeable.

Pour le composé CoMnAs la conductivité de type n ($\mu > E_F$) est plus étendue que celle pour le type p ($\mu < E_F$), cela est due de la dissimilitude entre la mobilité des électrons et des trous. Par contre pour les composés RhMnAs et IrMnAs la conductivité de type n ($\mu > E_F$) est inférieur à la conductivité pour le type p ($\mu < E_F$). Les trois zones principales sont bien illustrées dans la figure IV-11, la première lorsque $\mu < E_F$ ou la conductivité électrique des trois composés diminue à mesure que les concentrations de porteurs de charge (les trous) diminuent, ce qui les rend intrinsèques à mesure que le potentiel chimique se rapproche. La deuxième zone lorsque $\mu = E_F$ la conductivité électrique devient plus faible avec une maigre concentration de porteur de charge, la dernière zone ou $\mu > E_F$ les porteurs de charge qui sont les électrons vont augmenter avec l'augmentation de potentiel chimique ce qui engendre un accroissement de la conductivité électrique.

La conductivité thermique électronique, dans la figure IV-12 on remarque nettement que L'augmentation de la température entraîne une augmentation significative de la conductivité thermique électronique des trois matériaux, et l'allure de la conductivité thermique électronique est semblable à celle de la conductivité électrique par notion de : les porteurs de charge sont également des porteurs de chaleur.

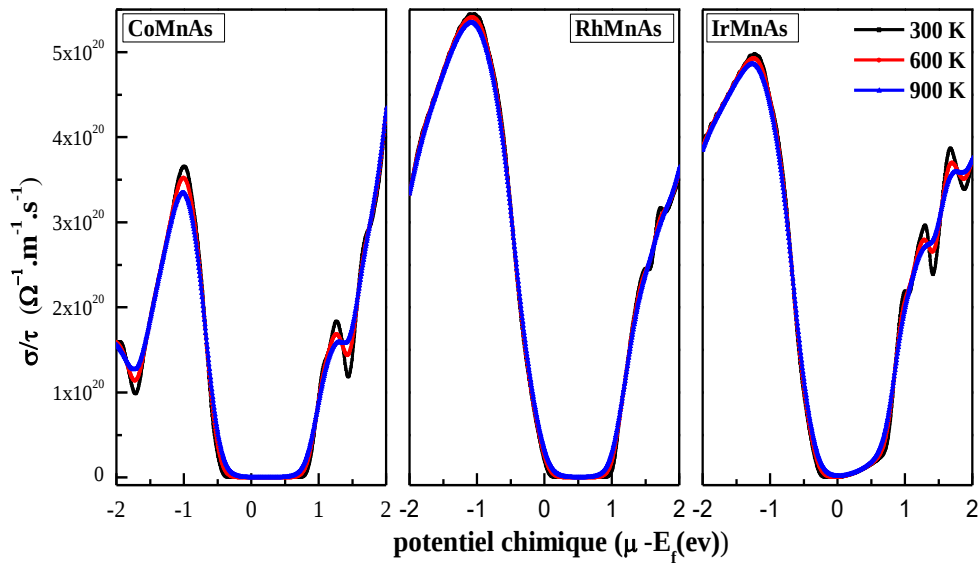


Figure IV.11 : Conductivité électrique σ/τ en fonction du μ .

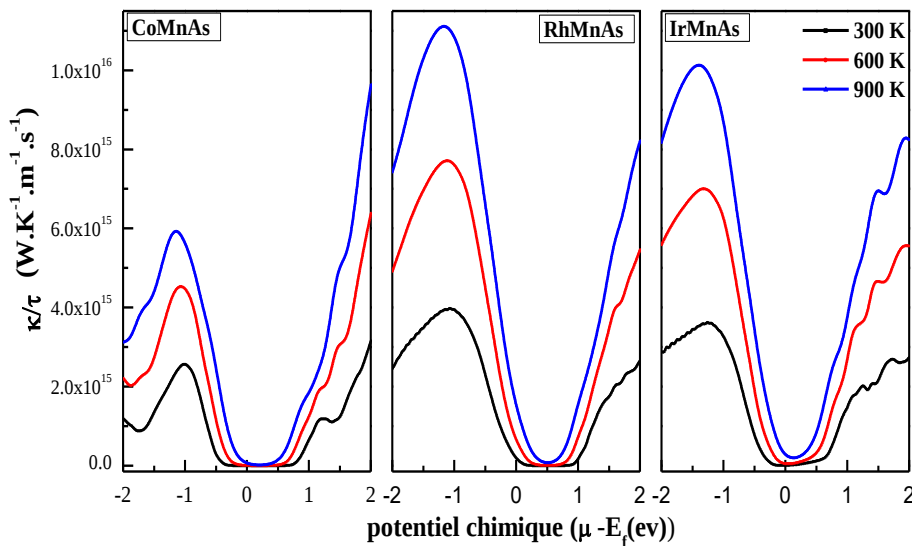


Figure IV.12 : Conductivité thermique électronique κ/τ en fonction du μ .

IV.2.4.c Facteur de puissance (PF)

La figure IV-13 présente le facteur de puissance en fonction de potentiel chimique, dont nous pouvons remarquer que le facteur de puissance PF augmente avec l'augmentation de la température et atteint une valeur maximale à $T=900^\circ\text{K}$ pour les trois composés, on remarque aussi deux pics de haute intensité, parmi eux, on observe un pic majeur proche de la limite du niveau de Fermi $\mu - E_F = -0.55$, et -0.48 respectivement pour les composés $X(X=\text{Co}, \text{Ir})\text{MnAs}$ dont les valeurs sont respectivement $1.899.10^{12}$, $1.46.10^{12} \text{ W/Mk}^2\text{s}$. Contrairement, le composé RhMnAs son pic principale est après le niveau de fermi précisément à $\mu - E_F = 1.048$ avec une valeur de PF $1.335.10^{12} \text{ W/Mk}^2\text{s}$.

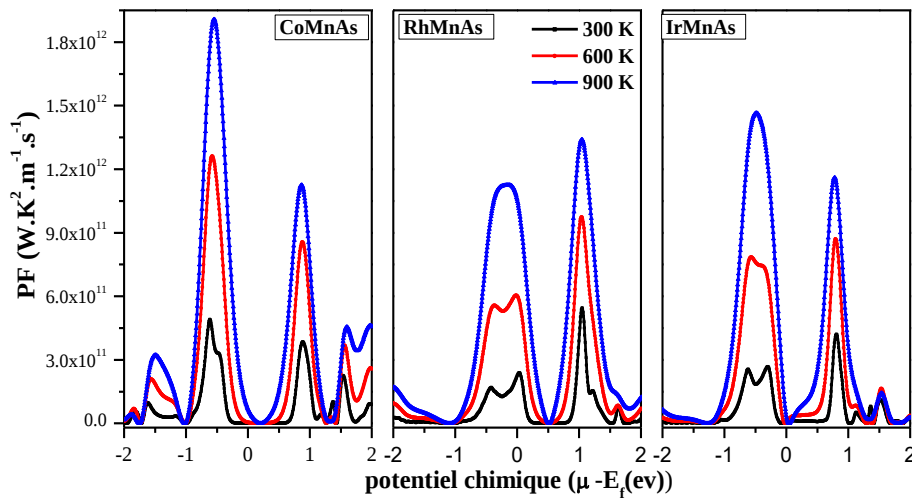


Figure IV.13 : Facteur de puissance (PF) en fonction du μ .

IV.2.4.d Facteur de mérite

Les performances d'un matériau thermoélectrique sont évaluées à l'aide d'une grandeur sans dimension appelée facteur de mérite, noté ZT . Ce facteur de mérite est déterminé par l'amélioration de la performance thermoélectrique du matériau :

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{k_e + k_l} \cdot T \quad (\text{IV-22})$$

Où : T la température absolue, S coefficient de Seebeck, σ conductivité électrique, k_e conductivité thermique électronique et k_l conductivité thermique du réseau.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons effectué des calculs pour évaluer l'efficacité thermoélectrique des composés étudiés. Nous avons examiné la variation du facteur de mérite en fonction du potentiel chimique sur une large plage de températures afin de déterminer si le

système était capable de maintenir de bonnes performances thermiques même à des températures élevées.

Dans la figure IV-14, ZT est maximal à la température de 300°K au niveau des pics seulement, mais dès que le ZT prend l'allure de chute les valeurs de la plus haute température (900°K) sont les dominantes par rapport à la température 300°K pour les trois matériaux.

Le facteur de mérite des composés CoMnAs et RhMnAs proche à l'unité dans la température ambiante, ce qui rend ces alliages des bons candidats pour les dispositifs thermoélectriques.

Les valeurs faibles du facteur de mérite associée au demi-Heusler IrMnAs sont dûes à leur faible valeur du coefficient de Seebeck et de la conductivité électrique, ainsi qu'à leurs valeurs élevées de la conductivité thermique, toutefois, on reporte les valeurs maximales suivantes :

-Le composé CoMnAs :

Pour T=300°K une valeur de 0.994302 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = 0.07398eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.97456 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = -0.004831eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.9472555 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = 0.065217eV$

.-Le composé RhMnAs :

Pour T=300°K une valeur de 0.992518 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = 0.422705eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.94987 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = 0.33574eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.8889 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = 0.27777eV$.

-Le composé IrMnAs :

Pour T=300°K une valeur de 0.9248 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = -0.1666eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.82568 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = -0.18115eV$.

Pour T=600°K une valeur de 0.7736 est obtenue pour une valeur de $\mu - E_F = -0.19565eV$.

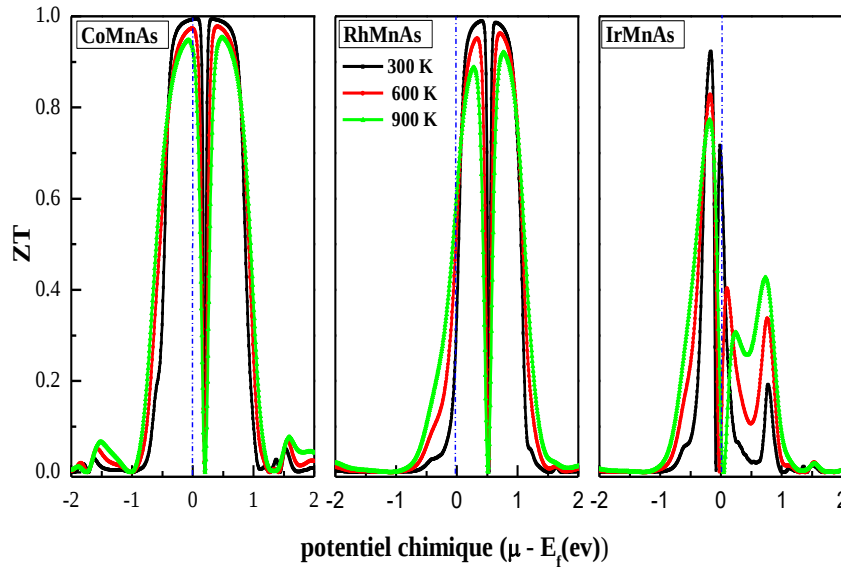


Figure IV.14 : Facteur de mérite (ZT) en fonction du μ .

Il est également important de mentionner que pour connaître la valeur de conductivité thermique κ_L , nous utilisons la formule de Slack, basée sur le rôle du mode acoustique dans le processus de transfert de chaleur du semi-conducteur, cela conduit à la formule suivante :

$$K_L = A \cdot \frac{M_a \cdot \delta \cdot n^{1/3} \cdot \theta_a}{\gamma^2 \cdot T} \quad (\text{IV-23})$$

Dans cette équation, $A = 2.43 \times 10^{-8} \times \left[1 - \frac{0.514}{\gamma} + \frac{0.228}{\gamma^2} \right]^{-1}$, $\gamma, M_a, n, \delta^3, \theta_a$ sont le paramètre de Grüneisen, la masse atomique moyenne, nombre d'atomes dans la cellule unitaire primitive, le volume par atome et la température de Debye acoustique ($\theta_a = \theta_D \cdot n^{-1/3}$) respectivement.

Les valeurs calculées de la conductivité thermique pour les trois composés sont :

$$K_L(\text{CoMnAs}) = 3,033, K_L(\text{RhMnAs}) = 13,107, K_L(\text{IrMnAs}) = 15,26 \text{ W.m}^{-1} \text{ °K}^{-1}$$

Remarque :

Malgré ces calculs examinant les propriétés physiques des trois composés demi-Heusler choisis, malheureusement nous n'avons pas pu trouver un composé similaire au polysilicium parmi eux, ce qui exige d'entamer une deuxième tentative du choix. On notera que nous avons exploité ces résultats et les publier dans une revue indexée.

IV.3 Deuxième tentative pour la sélection du matériau idéal

Pour notre seconde tentative nous avons choisi une seule combinaison pour un seul composé tirés du tableau périodique (figure IV-15) :

Élément de transition **X** : Fe (Fer) ; Élément de transition **Y** : Nb (Niobium) ; Élément Z du groupe III, IV ou V As (Arsenic).

Notons que nous avons vérifié la stabilité structurale de ce composé dans les mêmes conditions que celles supposées lors de la vérification des composés calculés précédemment. Nous avons constaté que ce composé demeure stable dans sa phase ferromagnétique.

Le calcul des constants élastiques à l'aide de l'approximation « stress-strain » nous permettra de déterminer tous les paramètres mécaniques mentionnés précédemment, ce qui nous aidera à mieux comprendre le comportement de ce matériau (tableau IV.5).

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra																
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Figure IV.15 : Choix du composé demi-Heusler FeAsNb.

Tableau IV-5 : Module de compression (B) GPa, Module de cisaillement (G) GPa, Module de Young (E) GPa, Coefficient de poisson (ν), le rapport B/G , la Micro dureté (H), Température de Debye (θ_D) en K, Température de Fusion (T_m) en °K.

Matériau	B	G	E	ν	B/G	H	A	CP	ρ	$T_m \pm 300$	θ_D
FeAsNb	214.693	100.81	261.498	0.26	2.13	9.97	1.01	46.67	8238.41	2608.3325	471.225

Selon les résultats illustrés dans le tableau IV.5 cet alliage est considéré comme un matériau ductile anisotrope selon les valeurs du rapport de Pugh, la pression de Cauchy et le facteur de Zener, de plus la valeur obtenue de E est plus au moins élevée ce qui démontre la caractéristique rigide de notre alliage étudié.

Nous concluons aussi d'après le tableau IV.5 que le matériau a un caractère d'une dureté considérable ce qui implique que cet alliage supporte les grandes charges et il pourra travailler dans des dispositifs de grandes échelles, et aussi les petites pièces électroniques ou mécaniques. Pour notre deuxième tentative, nous avons suivi les mêmes étapes que la première, mais sans représenter les courbes. Nous sommes arrivés à déterminer la valeur de conductivité électrique, conductivité thermique électronique à 300°K. Nous avons utilisé le code BoltzTraP conçu pour le calcul des propriétés thermoélectriques et évaluer la valeur de la conductivité électrique, cette valeur nous permet ensuite de déterminer la résistivité électrique, qui correspond à l'inverse de la conductivité électrique. Nous avons aussi calculé la valeur de la conductivité thermique K_L à l'aide de la formule de Slack (IV-23), ou nous avons trouvé une valeur encourageante proche de la valeur de conductivité thermique du polysilicium.

Remarque :

Les récentes évaluations des propriétés physiques du composé demi-Heusler FeAsNb suggèrent une proximité avec celles du polysilicium. Cette correspondance encourageante nous incite à passer à l'étape suivante, qui consiste à effectuer une modélisation approfondie à l'aide d'Ansys. Le principal but de cette modélisation est d'observer de manière précise le comportement d'un actionneur électrothermique. Nous souhaitons ainsi mieux comprendre ses réactions et ses performances.

IV.4 Modélisation de l'actionneur électrothermique

La modélisation réalisée dans Cette étude nous permet d'approfondir notre compréhension du comportement d'un actionneur électrothermique lorsqu'on remplace son matériau d'origine, notamment le polysilicium, par notre nouveau composé demi-Heusler FeAsNb. Nous avons présenté dans le tableau IV.6, l'ensemble des propriétés nécessaires calculées pour mener à bien notre modélisation du composé FeAsNb, ainsi que les propriétés déjà connues du polysilicium. Cette comparaison entre les deux matériaux nous permet d'évaluer les différences et les similitudes dans les performances de l'actionneur électrothermique en fonction du matériau utilisé.

Tableau IV-6 : Module d'Young en GPa, Coefficient de Poisson, Coefficient de dilatation thermique en $^{\circ}\text{K}^{-1}$, Résistivité électrique en Ωm , Conductivité thermique en $\text{W.m}^{-1} \text{ }^{\circ}\text{K}^{-1}$.

Matériau	E	ν	α	ϖ	K_L
Polysilicium	169	0.22	2.9×10^{-6}	0.23	50
FeAsNb	261.498	0.26	1.94×10^{-5}	0.224	47.8

IV.4.1 Géométrie de l'actionneur

La figure IV-15 suivante montre la géométrie et les dimensions de l'actionneur électrothermique. Les conceptions sont simulées dans la version Ansys. Le fonctionnement de l'actionneur implique trois phénomènes physiques couplés : la conduction du courant électrique, la conduction de la chaleur et les contraintes dues à la dilatation thermique. L'actionneur est activé électro-thermiquement. Un gradient de température se produit lorsqu'un courant électrique traverse les poutres suspendues, créant une résistance électrique et induisant ainsi une différence de température. Le concept du principe de conservation de l'énergie [13] est appliqué. L'équation d'énergie à l'état stationnaire avec une source de chauffage résistive peut être présentée comme suit :

$$\Delta(K_L \Delta T) + \frac{F^2}{\varpi} = 0 \quad (\text{IV-24})$$

Où K_L , F , ϖ and ΔT représentent respectivement le coefficient de conductivité thermique, le champ électrique, la résistivité électrique et la différence de température.

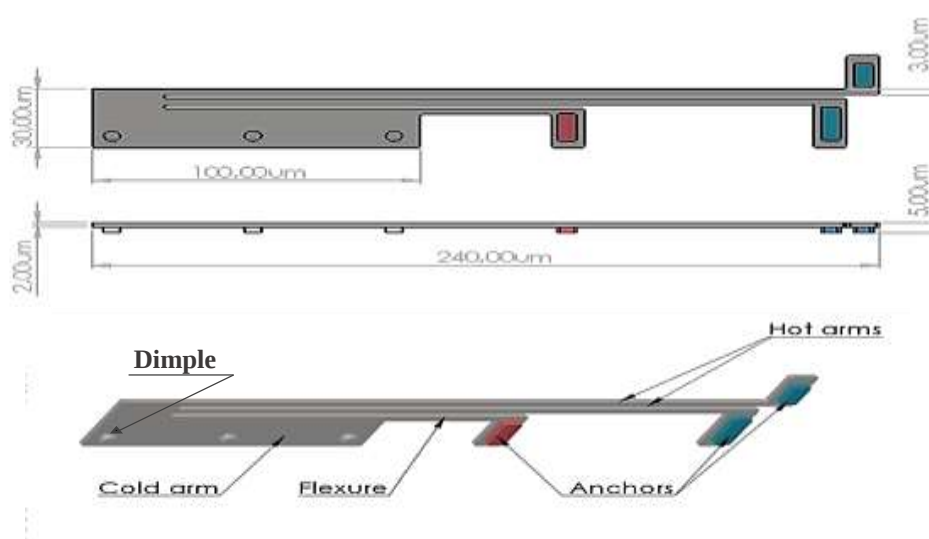


Figure IV.16 : Le micro actionneur électrothermique [14].

Un courant électrique traverse l'actionneur d'un point d'ancrage (Anchor) à l'autre, et la charge électrique (densité de courant) plus élevée dans la poutre chaude (hot arm) affronte une élévation de la chaleur et de l'expansion de l'actionneur par rapport à la poutre froide (cold arm), ce qui entraîne un mouvement d'arc latéral vers le côté de la poutre froide. Pour un élément

structurel unidimensionnel, la déviation axiale, ΔL , due à la dilatation thermique peut être obtenue par :

$$\frac{\Delta L}{L} = \alpha \Delta T \quad (\text{IV-25})$$

Où α est le coefficient de dilatation thermique du matériau, L est la longueur originale de l'élément et ΔT est la différence de température.

IV.4.2 Les conditions aux limites

Un potentiel électrique de 150 V est appliqué entre les points d'ancrage de la poutre chaude et les points d'ancrage de la poutre froide (figure IV-16). Toutes les autres surfaces sont isolées électriquement. La température des bases de ces points d'ancrage et les appuis simples est fixée à celle du substrat (figure IV-17). Étant donné que la structure de cet actionneur thermique est entourée par conduction à travers de fines couches d'air, cela peut être mis en œuvre sous forme de condition de contact thermique ou de "flux de chaleur convectif" où le coefficient de flux de chaleur représente l'inverse de la résistance thermique. Dans ce modèle, nous avons utilisé la condition de flux de chaleur. Le coefficient de transfert de chaleur est donné par la conductivité thermique de l'air multipliée par la distance entre les surfaces environnantes pour le système [13].

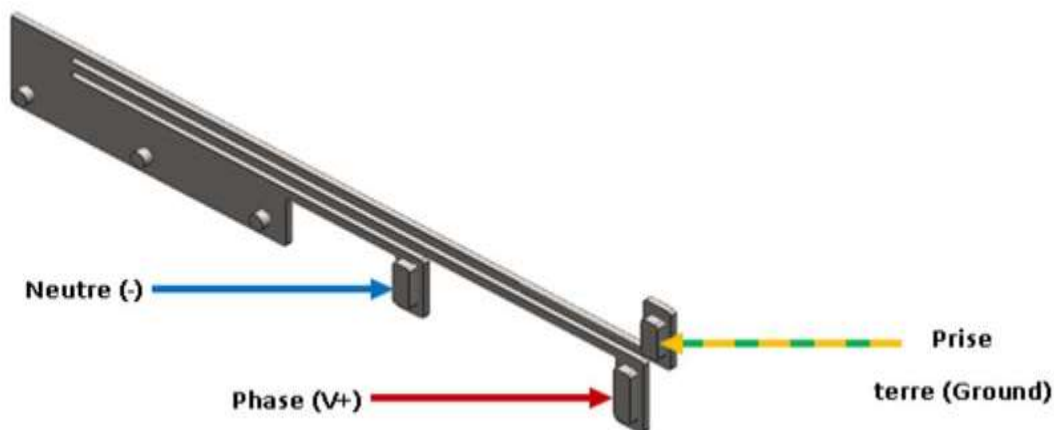


Figure IV.17 : Conditions aux limites électriques.

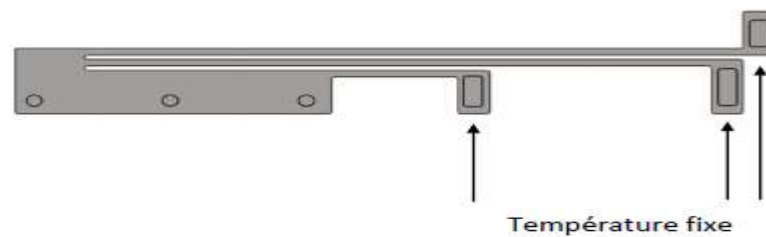


Figure IV.18 : Conditions aux limites de transfert de chaleur.

Les trois bras sont fixés mécaniquement à leurs trois extrémités. Les appuis simples peuvent se déplacer librement dans le plan xy, mais ils ne peuvent pas se déplacer dans la direction perpendiculaire au substrat (direction z) (voir figure IV-18 [14]).



Figure IV.19 : Conditions et contraintes structurelles aux limites.

IV.4.3 Le maillage

Le logiciel ANSYS offre une technologie de maillage intelligente qui permet d'obtenir rapidement un maillage optimal pour tous les types de modèles. Grâce à des algorithmes intelligents et automatiques, nous sommes en mesure de créer un maillage de haute qualité. De plus, l'ajout de commandes d'ajustement, le cas échéant, est très simple. Cette fonctionnalité nous permet de personnaliser et d'optimiser notre maillage en fonction de nos besoins spécifiques, garantissant ainsi une précision et une fiabilité accrues dans nos analyses (figure IV-19).

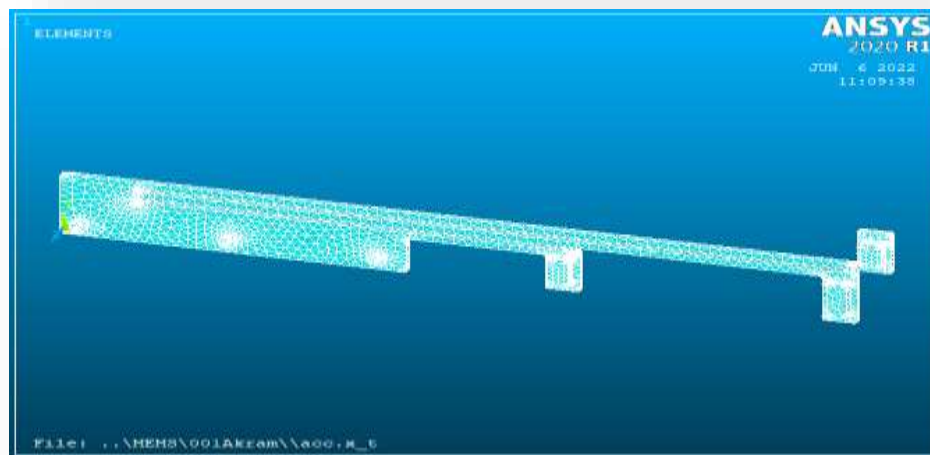


Figure IV.20 : Résultat de maillage.

IV.4.4 Résultats de la modélisation

Les figures IV-21, IV-22, IV-23 représentent le déplacement de l'actionneur électrothermique, l'évolution de la température du substrat ainsi que Courbe de déplacement maximum pour les deux matériaux (PolySilicon et FeAsNb), respectivement.

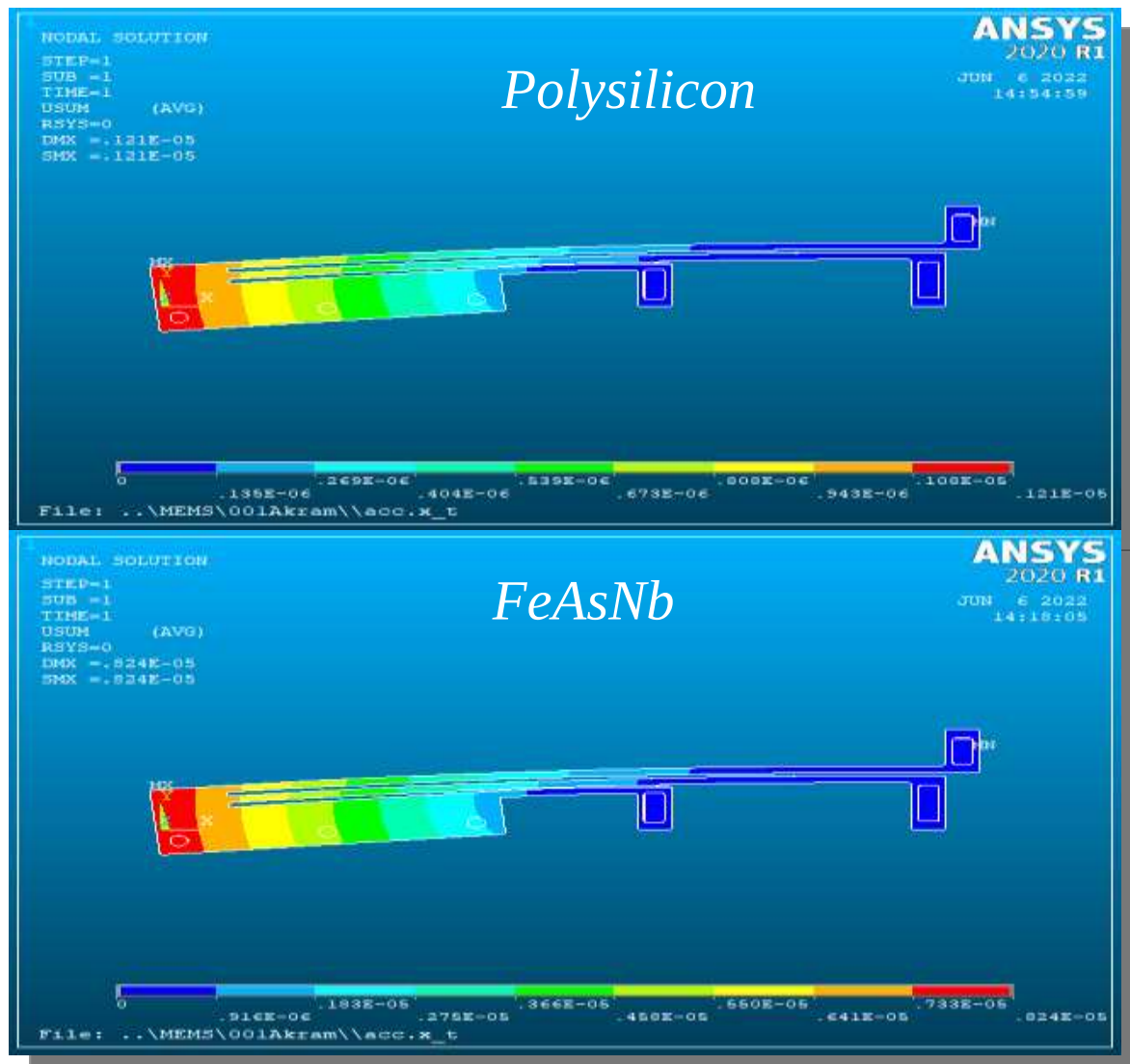


Figure IV.21 : Déplacement de l'actionneur électrothermique pour les deux matériaux polysilicon et FeAsNb.

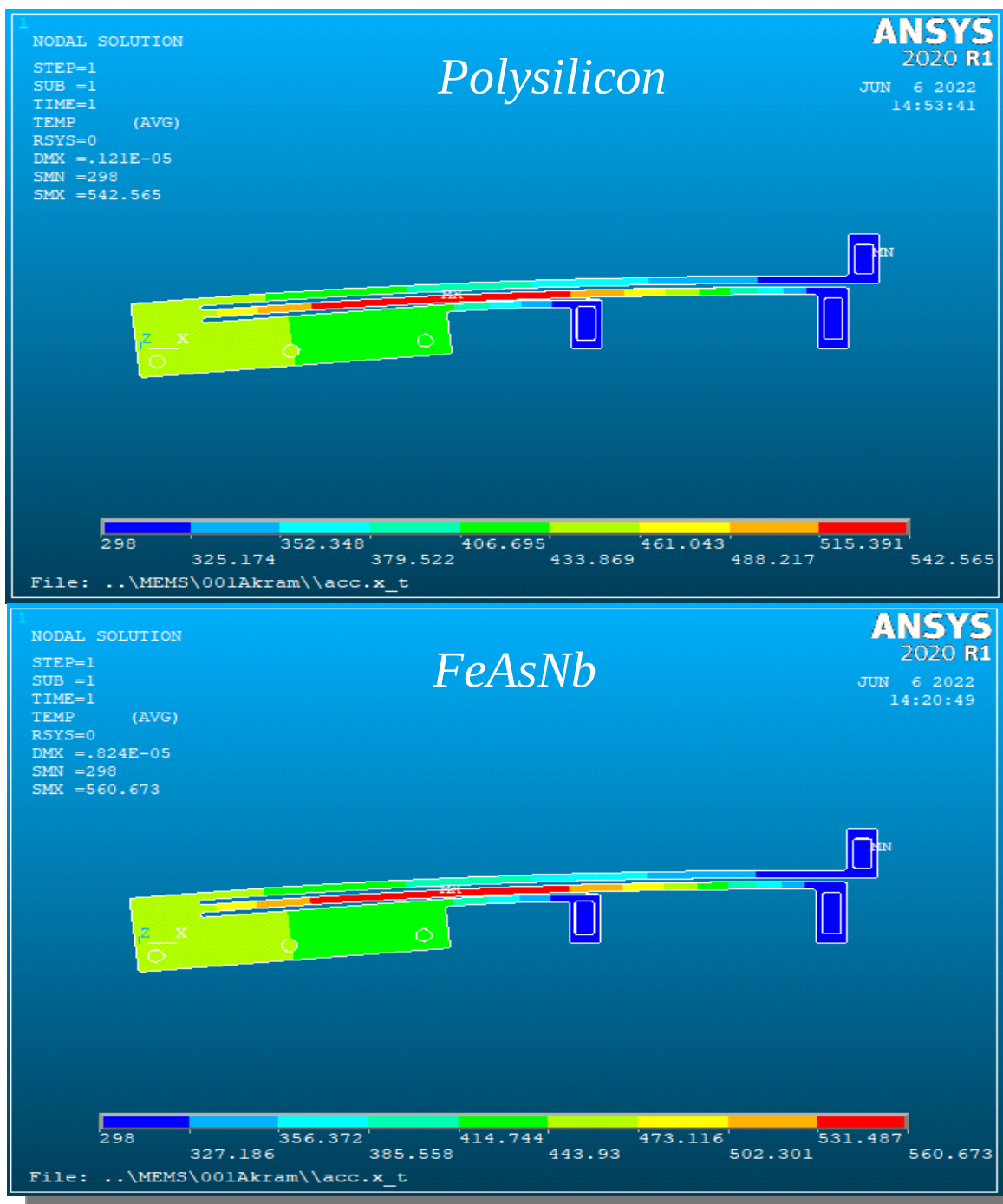


Figure IV.22 : Evolution de la température du substrat pour les deux matériaux polysilicon et FeAsNb.

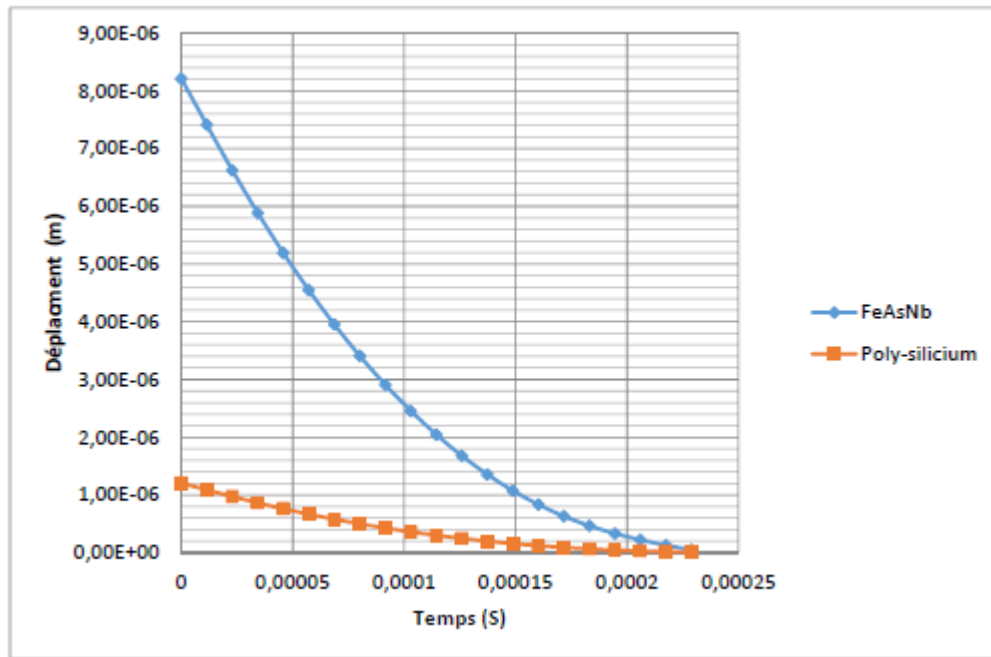


Figure IV.23 : Courbe de déplacement maximum pour les deux matériaux (PolySilicon et FeAsNb).

D'après les figures (21, 22 et 23), on observe que dans les mêmes conditions, le déplacement de l'alliage FeAsNb est sept fois supérieur à celui du polysilicium. Cela est dû à la déformation considérable, avec une convergence des températures plus élevée de 18,1 °K dans le FeAsNb par rapport au polysilicium.

La figure IV-23 met en évidence une pente plus prononcée de la courbe pour le FeAsNb par rapport au Polysilicium, ce qui indique que l'alliage a un temps de réponse plus court.

IV.5 Bibliographies

- [1] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30,244, (1944).
- [2] Ahmed, A., Contribution de l'approximation LDA+U au calcul des propriétés physiques des Heusler Co_2MnX ($\text{X}=\text{Ge}$, Sn et Si) par la méthode FP-LMTO, (2011).
- [3] Trinite, V., Etude théorique des phases du titane, (2006).
- [4] Ould-Mohamed, M., Boukri, K., et Ouahrani, T., Structural, vibrational, electronic, thermodynamic and thermoelectric properties of CaCdSi Half Heusler compound : A first-principles study, *Materials Today Communications* **33** (2022) 104668.
- [5] Stillinger, F. H., et Weber, T. A., Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Physical Review. B, Condensed Matter* **31** (1985) 5262-5271.
- [6] Sebihi Nassima, Thèse de Doctorat en physique, Université de Sétif 1, Algérie (2013).
- [7] Özduran, M., Candan, A., Akbudak, S., Kushwaha, A. K., et İyigör, A., Structural, elastic, electronic, and magnetic properties of Si-doped Co_2MnGe full-Heusler type compounds, *Journal Of Alloys And Compounds* **845** (2020) 155499.
- [8] Issam, A., Étude des propriétés physique des alliages Heusler et Half-Heusler, (2018).
- [9] Debye, P., Zur Theorie der spezifischen Wärmen, *Annalen Der Physik* **344** (1912) 789-839.
- [10] Blanco, M. A., Francisco, E., et Luaña, V., GIBBS : isothermal-isobaric thermodynamics of solids from energy curves using a quasi-harmonic Debye model, *Computer Physics Communications* **158** (2004) 57-72.
- [11] A. Otero-de-la-Roza, D. Abbasi-Pérez, V. Luaña, Gibbs2: A new version of the quasi-harmonic model code. II. Models for solid-state thermodynamics, features and implementation, *Comput. Phys. Commun.* **182**, 2232-2248 (2011).
- [12] Anissa, B., Radouan, D., Benaouda, B., et Omar, A., First-principles study of structural, electronic, thermodynamic, and thermoelectric properties of a new ternary half-Heusler alloy PdZrGe , *Chinese Journal Of Physics* **56** (2018) 2926-2936.
- [13] Melnyk, M., Kernyskyy, A., Lobur, M., Zajac, P., Szermer, M., Maj, C., et al., Optimization of microelectric actuator design using golden section search to get the defined output characteristics, (2014).
- [14] Melnyk.M., Kernyskyy.A, Lobur.M., Szermer.M., Zajac.P, Zabierowski.W, Study of Characteristics of MEMS Thermo-Electric Actuators. Proceeding of the X-th International Conference MEMSTECH'2014 "Perspective Technologies and Methods in MEMS Design", 22–24, Lviv, Ukraine. – P. 39–41, (June 2014).
- [15] Li, Y. M., Chen, Q. H., Chen, Y. J., et Wu, W. G., An Improved Design Method of the MEMS-Based Folded-Beam Micromirror, *Applied Mechanics And Materials* **529** (2014) 135-138.
- [16] Behera, D., Akila, B., Amraoui, R., Kadri, S., Mukherjee, S., Salah, M., et al., Excellent Thermoelectric Performance in KBaTh ($\text{Th} = \text{Sb}$, Bi) Based Half-Heusler Compounds and Design of Actuator for Efficient and Sustainable Energy Harvesting Applications, *Crystals* **13** (2023) 1551.
- [17] Nimbal, Girija M., Sv Halse, and Firdous G . Naziya. Modelling and simulation of thermal actuator using polysilicon material, *J. Pure Appl. Ind. Phys* **3** (2013) : 193-228.

-
- [18] Ashraf, M. W., Tayyaba, S., et Afzulpurkar, N., Micro Electromechanical Systems (MEMS) Based Microfluidic Devices for Biomedical Applications, *International Journal Of Molecular Sciences* **12** (2011) 3648-3704.
- [19] Vij, Ruchika, Balwinder Singh, and D. K. Jain. "Design and analysis of electro thermally actuated microgripper." *IOSR J. VLSI Signal. Process* 4 (2014) : 46-51.
- [20] Shaheen, M. A. M., Hasanien, H. M., Turkey, R. A., Calasan, M., Zobaa, A. F., et Aleem, S. H. E. A., OPF of Modern Power Systems Comprising Renewable Energy Sources Using Improved CHGS Optimization Algorithm, *Energies* **14** (2021) 6962.
- [21] Geisberger, A. A., Sarkar, N., Ellis, M., et Skidmore, G. D., Electrothermal properties and modeling of polysilicon microthermal actuators, *Journal Of Microelectromechanical Systems* **12** (2003) 513-523.
- [22] Alwan, A., et Aluru, N. R., Analysis of Hybrid Electrothermomechanical Microactuators With Integrated Electrothermal and Electrostatic Actuation, *Journal Of Microelectromechanical Systems* **18** (2009) 1126-1136.
- [23] Lo, C., Lin, M., et Hwan, C., Modeling and analysis of electro-thermal microactuators, *Journal Of The Chinese Institute Of Engineers* **32** (2009) 351-360.

Conclusion générale

Dans cette étude ab-initio, les propriétés élastiques, mécaniques, thermodynamiques et transports des composés demi-Heusler ont été prédits à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), pour but de connaître quelques propriétés qui sont nécessaires dans l'exécution d'une modélisation éléments finis par ANSYS. Cette modélisation a été effectuée sur la géométrie d'un actionneur électrothermique pour faire une comparaison entre les résultats de modélisation de l'actionneur en matériau de base Polysilicium et l'actionneur lorsque on remplace ces propriétés par les propriétés calculés du composé FeAsNb.

Les méthodes modernes de DFT (Density Functional Theory) et de ab-initio ont démontré leur efficacité pour faciliter la prédiction rapide des propriétés physiques dans de nombreux domaines. Dans notre domaine spécifique, nous espérons également bénéficier de leur contribution significative dans le but de valider nos résultats.

Les résultats de la modélisation par éléments finis ont démontré que l'actionneur utilisant le matériau FeAsNb présente des performances supérieures à celles de l'actionneur utilisant le polysilicium. Les simulations ont mis en évidence des avantages significatifs en termes de réponse mécanique, de déformation, de conductivité électrique et de conductivité thermique pour le FeAsNb. Cependant, afin de valider ces résultats de modélisation prometteurs, des essais physiques et des mesures sur des prototypes ou des échantillons réels sont essentiels pour valider les résultats de la modélisation et confirmer les performances du matériau FeAsNb par rapport au polysilicium.

La performance d'un actionneur est influencée par de multiples facteurs, comprenant les caractéristiques intrinsèques du matériau, la conception spécifique de l'actionneur, ainsi que les conditions environnementales dans lesquelles il opère. Ces éléments interagissent de manière complexe pour déterminer les performances globales de l'actionneur.