



RESUME DE MEMOIRE DE MAGISTER

Nom & Prénom(s)	BOUAYED Mohammed Zakarya
E-mail (obligatoire)	<a href="mailto:fcjaki@hotmail.fr">fcjaki@hotmail.fr</a>
Spécialité	Physique
Titre	<b>Structure Electronique des Composés semi-heusler : XMSb (X=Fe, Co ; M=Ti, V, Nb).</b> <b>Etude Ab-initio</b>
Date de soutenance	15/01/2013
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	Pr. YAKOUBI Abdelkader

**Résumé :**

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et élastique d'une série des composés Semi-Heusler XMSb (X = Fe, Co, M = Ti, V, Nb), Pour ce la, nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées linéairement au potentiel (FP-LAPW) basée sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons étudié les propriétés structurales et les propriétés électroniques avec la LDA pour le potentiel 'échange et de corrélation, ainsi on a appliqué une version modifiée de potentiel d'échange proposé par Becke et Johnson (MBJ) au composés pour calculé le gap. La différence entre les structures de bandes obtenue par l'approximation de la densité locale (LDA) et le potentiel MBJLDA est également discutée. Et enfin, nous avons calculé les constantes élastiques.

**Mots Clés :** Alliage de heusler ; La structure électronique ; Les Semi-métaux.

**Abstract :**

In this work, we have studied the structural, electronic and elastic properties of a series of half-heusler compounds XMSb(X=Fe, Co; M=Ti,V,Nb). For this, we used the method of linear augmented plane wave (FP-LAPW) based on density functional theory (DFT).

We studied the structural properties, and electronic properties with LDA for exchange and correlation potential and a modified version of the exchange potential proposed by Becke and Johnson is tested on solids for the calculation of band gaps..The diference between band structures obtained using the local density approximation (LDA) and MBJLDA potential is also discussed. And finally, we calculated the elastic constants.

**Keywords:** Heusler alloys; Electronic structure ; Half-metallic.

**ملخص**

في هذا العمل ، قمنا بدراسة الخصائص البنيوية، الالكترونية و المرورية لسلسلة من مركبات semi-heusler XMSb (X = Fe, Co, M = Ti, V, Nb) من اجل هذا قد استخدمنا طريقة FP-LAPW المبنيية على نظرية الكثافة (DFT). قمنا بدراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية بالاستعمال نظرية تقريب الكثافة المحلية LDA. و من جهة أخرى قمنا بتطبيق نسخة معدلة لكمون التبادل المقترحة من طرف Becke و Johnson (MBJ) على المركبات من اجل حساب الفجوة. كما أننا ناقشنا الفرق الذي تحصلنا عليه بالاستعمال الاسلوبين. وفي الاخير قمنا بحساب الثوابت المرنة.

**الكلمات المفتاحية :** سبائك Heusler ، البنية الالكترونية ، أشباه المعادن.