

Dans ce travail, nous nous sommes intéressé aux propriétés des composés Fe-Ni en massif et en surfaces. Nous avons effectué une étude théorique pour simuler l'ordre magnétique et estimer les moments magnétiques des atomes de Fe et de Ni dans leur différents environnements atomiques. Nous avons adopté deux approches, l'une basée sur un modèle de calcul semi-empirique et l'autre basée sur un formalisme *ab-initio*. Ces deux approches s'avèrent très complémentaires.

Les calculs semi-empiriques, nécessitant la connaissance d'un certain nombre de paramètres, sont développés dans l'espace réel et s'appliquent à des systèmes de dimension réduite comme ceux présentant des défauts ponctuels ou étendus. Ces systèmes sont plus proches des composés réels étudiés expérimentalement, la comparaison des résultats simulés et ceux mesurés par l'expérience devient donc possible et directe. Les paramètres de ce modèle de calcul sont déterminés à partir d'une étude du système massif. En effet, ces systèmes présentant une symétrie 3D sont relativement plus facile d'accès aux méthodes de calculs *ab-initio*, qui donnent des résultats très précis. De même, ces paramètres peuvent être ajustés sur les résultats expérimentaux sur les systèmes massifs. Nous avons donc ajusté les paramètres (notamment les intégrales d'échange) de telle façon à reproduire la structure magnétique de l'environnement du volume.

La transférabilité de ces paramètres vers les systèmes de dimension réduite (les surfaces) étant prouvé. L'étude du composé $FeNi_3$ en surface a été précédée par l'étude des éléments Fe et Ni et par la suite de l'alliage $FeNi_3$ en volume.

Dans le système $FeNi_3$, on a vu que contrairement aux études du magnétisme des surfaces des métaux de transition purs (fcc), qui avancent souvent que les surfaces (011) et (001), dans cet ordre, sont plus magnétique que la surface (111) compte tenu de leur coordinations respectives, cette étude a montré que d'autres considérations sont à prendre en compte pour les surfaces des alliages à base des métaux de transition (et en particulier les alliages de Fer), dont spécialement la présence d'un environnement dissemblable autour de l'atome de Fe qui exhibe ce dernier à engendrer un comportement différent de celui de l'état pur.

On notera donc que l'effet de la surface n'est pas dominant pour le magnétisme, car il

faut considérer l'effet de l'alliage du Fe avec le Ni lui même. Le $FeNi_3$ peut être considéré comme un alliage dilué du Fe. Des études ont montré que le moment du Fe augmente avec la concentration du Ni. Ceci nous amène à conclure que le moment du Fe d'interface est augmenté par son voisinage Ni immédiat. Pour expliquer les moments des surfaces de cet alliage, nous avons repris quelques arguments donnés par Victora et Falicov pour les surfaces de l'alliage $FeCo$ [48] et renforcer par résultats des études sur les interfaces[45, 49]. Cependant cet effet n'est pas avantageux pour le Fe aux interfaces Fe/V , par parce qu'il détruit ces moments, le V présentant une interaction électron-électron plus faible que le Fe, ce qui provoque la diminution des moments du moment de ce dernier. Un appui à cette hypothèse est donné par les expériences de diffraction de neutrons qui montrent que les impuretés de Fe dans le V ne présentent aucun moment magnétique, contrairement au Pd où une impureté de Fe conduit à des moments très grands. De même des calculs sur les impuretés de Fe dans le V, ne montrent aucun moment magnétique sur les atomes de Fe dès qu'il a plus de 4 atomes de V dans son premier voisinage[46].

Ceci suggère pour le cas du Co et du Ni que leur interactions électron-électron respectives assistent, une fois leur moment saturés, la faible interaction électron-électron du Fe en tentant de saturer le moment magnétique de ce dernier aussi.

Un autre facteur qui contribue aussi à l'augmentation des moments magnétiques dans l'alliage $FeNi_3$ est un paramètre du réseau de $6.7u.a$, qui est grand relativement à $6.55u.a$ du Ni *fcc*, parce qu'un paramètre de réseau grand implique une largeur de bande petite et donc un moment magnétique grand.

L'étude de la ségrégation quant à elle, a montré que la migration du Fe à la surface de l'alliage commence à un premier temps par influencer les moments du Fe qui sont révisés à la baisse et dans un deuxième temps à former un état AFM par plans en surface au fur et à mesure que la ségrégation augmente, entraînant par l'occasion la disparition des moments magnétiques du Ni des couches proches de la surface.