

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à l'étude des reconstructions magnétiques à la surface des composés métalliques binaire B2-FeRh et FeCr. La structure électronique et magnétique des surfaces de ces systèmes est déterminée par des calculs de structure de bande en liaisons fortes semi-empirique et par la méthode TB-LMTO-ASA.

L'étude des propriétés magnétiques de surface du composé B2-FeRh n'a pas révélé de changements notables par rapport à ceux du volume. Lorsque le Fe ou le Rh sont considérés sur la surface (001), la configuration d'équilibre est la même que celle du volume. Le FeCr quant à lui présente un comportement en surface très différent de celui du volume de cet alliage. La surface (001) est caractérisée par une configuration antiferromagnétique de type $c(2 \times 2)$, avec un moment magnétique moyen nul en surface, alors que la surface (111) présente une configuration d'équilibre de type $p(1 \times 1)$ avec un moment moyen de $-3\mu_B$ en excellent accord avec l'expérience.