

Propriétés électronique, magnétique et optique des nitrures XN de métaux de transition, (X = Fe, Co, Ni, Cu)

Yamina Cheballah¹, Abdelhamid Ziane¹, Said Bouarab¹

^{1.} Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Faculté des Sciences, Université Mouloud Mammeri, BP N°17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie.

Résumé — Nous avons effectué des calculs de premiers principes, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, en utilisant le code LMTO-ASA. Nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurale, magnétique et optique des nitrures de métaux de transition FeN, CoN, NiN et CuN. Nous avons optimisé les paramètres de réseau, à partir de la variation de l'énergie totale en fonction du paramètre d'équilibre des quatre composants, dans deux types de structures cristallines : rock-salt et zinc-blende et pour différentes configurations magnétiques. Nos résultats montrent que les nitrures étudiés se stabilisent dans la structure rock-salt. Le nitrure de fer est ferromagnétique alors que les nitrures de cobalt, de nickel et de cuivre sont non magnétiques. Nous avons également présenté les résultats de la réponse optique des quatre nitrures à partir de la variation de la partie imaginaire de la fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon. Dans le but d'identifier les origines des pics d'absorption, nous avons analysé les densités d'états partielles des atomes constituant les composés, ainsi que les structures de bandes d'énergie. Nous avons noté que la réponse optique des nitrures étudiés est très semblable aux fréquences de photon inférieures à 2 eV, mais diffère aux fréquences élevées.

Mots-clés: Nitrures de métaux de transition, structures rock-salt et zinc-blende, fonction diélectrique.

I. Introduction

Les nitrures de métaux de transition sont des matériaux intéressants du point de vue de leurs propriétés d'usage qui leur permettent d'être des candidats potentiels pour de nombreuses applications. La plus part de ces métaux se cristallisent dans des structures de type rock-salt (RS) et zinc-blende (ZB). A titre d'exemple le FeN a été synthétisé dans deux types de structures cristallines, possédant un caractère antiferromagnétique dans la structure cubique à faces centrées de type RS [1-3] et un état non magnétique dans une structure de type ZB [1-4], CoN est non magnétique et se cristallise dans les deux types structures RS [5-6] et ZB [7]. Beaucoup d'autres travaux expérimentaux et théoriques ont été entrepris dans le cadre des nitrures FeN [1-4, 8-12] et CoN [5-7, 8-14], mais qui montrent un désaccord, du point de vue de la structure cristalline, paramètre de réseau et

comportement magnétique. Bien que les nitrures de nickel et de cuivre n'ont pas encore été synthétisés, beaucoup de travaux théoriques existent concernant la structure électronique de ces deux nitrures [13-15]. Dans le but d'expliquer le désaccord entre les résultats expérimentaux et de prédire de nouvelles propriétés, nous proposons d'étudier des propriétés structurales et électriques des nitrures de fer, de cobalt, de nickel et de cuivre.

Ce papier est organisé comme suit : après une introduction, nous exposerons brièvement la méthode de calculs utilisée. Le paragraphe 3 est consacré aux résultats et discussions, le paragraphe 4 aux conclusions générales.

II. Méthode de calculs

Nos calculs sont basés sur la méthode LMTO-ASA (Linear Muffin-Tin Orbital in the Atomic Sphere Approximation) [16]. Les effets d'échange-corrélation ont été pris en compte dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) [17]. Les intégrations dans la zone de

Auteur correspondant: Yamina Cheballah,
Domaine de recherche: Physique des matériaux
Adresse. Université de Tizi-Ouzou
E-mail: Yamina_Cheballah@yahoo.fr

Brillouin sont effectuées en employant la technique des tétraèdres [18]. Les calculs ont été convergés sur des maillages de la première zone de Brillouin de plus en plus denses jusqu'à $(k_x, k_y, k_z) = (14, 14, 14)$. Les critères de convergence dans le processus auto-cohérent ont été fixés à $\Delta E = 10^{-5}$ Ry pour l'énergie totale et une différence de charge de $\Delta Q = 10^{-5}$ entre deux itérations successives.

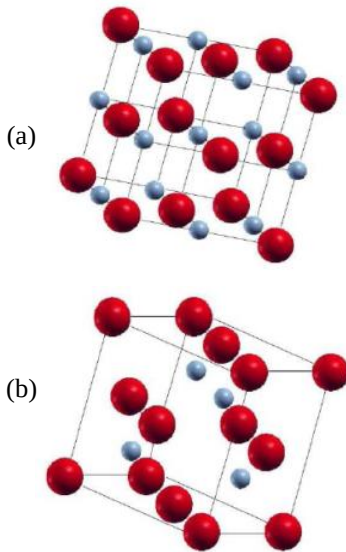


Fig. 1 Schéma illustratif des structures cristallines rock-salt (a) et zinc-blende (b).

Les structures RS et ZB sont considérées comme étant les structures les plus usuelles des composants binaires de type AB, comme dans le cas des nitrures de métaux de transition. Nous présentons par la Fig. 1 (a et b) les deux types de structure. Les atomes X (X étant le métal de transition dans le nitrure XN) dans le cas des deux types de structure RS et ZB, forment un réseau cubique à faces centrées (*cfc*) avec différentes coordination de l'atome d'azote. Dans la structure RS, les atomes d'azote occupent des sites octaédriques du *cfc* où chaque atome X possède six atomes premiers voisins d'azote. Dans la structure ZB, ils occupent les sites tétraédriques du *cfc* où chaque atome de Fe possède quatre coordinations avec l'atome d'azote.

La méthode LMTO est bien adaptée au calcul de la fonction diélectrique [19-21] à partir des probabilités de transitions entre les différentes bandes d'énergie du cristal. Elle permet ainsi, la

détermination précise des symétries de bandes impliquées dans les transitions.

La réponse optique du système est reliée à la fonction diélectrique complexe :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

où ω est l'énergie du photon. Chacune des composantes $\varepsilon_1(\omega)$ et $\varepsilon_2(\omega)$ contient les contributions intra-bandes ($n = n'$) et les contributions inter-bandes ($n \neq n'$) ou terme de Drude:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \varepsilon_1^f(\omega) + \varepsilon_1^b(\omega) \quad (2)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_2^f(\omega) + \varepsilon_2^b(\omega) \quad (3)$$

Les indices f et b désignent, respectivement, les contributions des électrons libres qui ne sont importantes que pour des valeurs de ω tendant vers zéro ($\propto \omega^{-3}$), terme qui sera négligé dans ce travail ainsi que les contributions des transitions de bande à bande.

La partie réelle de la fonction diélectrique $\varepsilon_1(\omega)$, donnant la dispersion, est reliée à $\varepsilon_2(\omega)$, responsable de l'absorption, par les relations de dispersion de Kramers-Kronig. Ici, nous avons limité nos calculs à la partie imaginaire de la fonction diélectrique.

III. Résultats et discussions

III.1. Propriétés électroniques et magnétiques

Nous avons effectué des calculs pour l'optimisation du paramètre de réseau et l'étude du comportement magnétique de chaque nitrure. Les calculs ont été faits dans le cas de deux types de structures cristallines RS et ZB pour différentes configurations magnétiques, à savoir : nonmagnétique, ferromagnétique et antiferromagnétique. Nous présentons sur la Fig. 2 (a, b, c et d) la variation de l'énergie totale du système en fonction du paramètre de réseau. Nos résultats montrent que les nitrures étudiés sont plus stables dans la structure RS que dans la structure ZB. Les nitrures CoN, NiN et CuN se stabilisent dans l'état nonmagnétique alors que l'état fondamental du FeN est ferromagnétique.

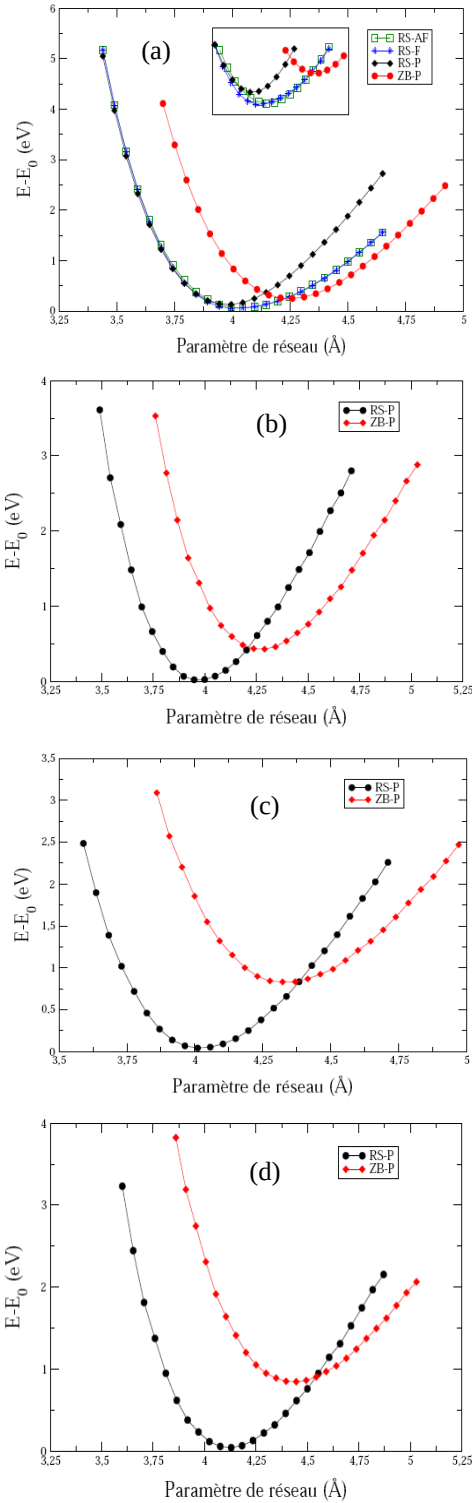


Fig. 2 Energie totale en fonction du paramètre de réseau : a) Etats nomagnétique, ferromagnétique et antiferromagnétique du FeN dans la structure RS et nomagnétique dans la structure ZB. b) Etats nomagnétiques du CoN RS et CoN ZB. c) Etats nomagnétiques du NiN RS et NiN ZB. d) Etats nomagnétiques du CuN RS et CuN ZB.

Nous avons donné dans la Table 1, les différents résultats obtenus par le calcul des paramètres de réseau et d'autres résultats théoriques et expérimentaux pour comparaison. Nous remarquons que les paramètres de réseau calculés, sont dans l'ensemble en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Le FeN dans la structure RS à l'état NM possède un paramètre de réseau de 3.98 Å qui est en bon accord avec les résultats théoriques 3.967 [8], 4.02 [9] et 3.98 [10] Å. A l'état F, le nitru FeN dans la structure RS possède un paramètre de réseau de 4.00 Å, qui est en très bon accord avec les résultats théoriques 4.021 [8], 4.11 [9] et 3.99 Å [10]. A l'état AF, la différence entre notre résultat (4.04 Å) et les résultats expérimentaux 4.50 [1], 4.52 [2], 4.50 Å [3] est large. L'erreur de calcul est estimée à 10 %. Cependant, notre résultat est similaire à d'autres résultats théoriques : 3.99 [10], 4.20 [11] et 4.00 Å [12]. La valeur calculée (4.25 Å) du FeN dans la structure ZB à l'état NM est proche des valeurs expérimentales 4.33 [1], 4.35 [2], 4.33 [3] et 4.307 [4] Å. Comparé à l'expérience, notre résultat est sous-estimé de 1 % à 2 %. Il est aussi en bon accord avec les résultats théoriques 4.195 [8] et 4.36 Å [11]. Nous remarquons que toutes les méthodes de calculs donnent des valeurs plus faibles que les résultats expérimentaux, cela peut être attribué à la non-stœchiométrie des échantillons produits.

Nous avons également calculé le moment magnétique de l'atome de fer dans le composé FeN avec la structure RS en état ferromagnétique, il est de $1.26 \mu_B$, résultat très proche de celui trouvé par A. Houari et *al.* [9]. A l'état antiferromagnétique nous trouvons un moment magnétique de $1.98 \mu_B$ sur l'atome de fer. Nous tenons à signaler que l'état antiferromagnétique peut être considéré comme un état dégénéré vu que la différence d'énergie à l'équilibre par rapport à l'état ferromagnétique est de 0.006 eV (voir Fig. 2.a).

Nous avons également donné les paramètres de réseau du nitru CoN, dans la Table 1. Le paramètre de réseau calculé (3.98 Å) dans la structure RS à l'état NM est loin des valeurs expérimentales qui sont de 4.27 [5] et 4.28 Å [6], mais très proches des valeurs théoriques obtenues par d'autres auteurs : 3.964 [8] et 4.05 Å [13]. L'erreur est estimée à 7 % par rapport aux résultats expérimentaux. Le paramètre de réseau dans la structure ZB à l'état NM est de 4.27 Å

qui est en bon accord avec les résultats : expérimentale 4.297 Å [14] et théoriques 4.215 [8], 4.29 [13] et 4.297 Å [13]. Notre résultat est sous-estimé de 0.6 % par rapport à l'expérience.

Table 1. Propriétés structurale et magnétique des nitrures FeN, CoN, NiN et CuN à l'équilibre, dans le cas de deux types de structures cristalline RS et ZB. Paramètre de réseau (a_0) et moment magnétique de Fe (entre parenthèses).

	a_0 (Å)		
	Nos Cal.	Exp.	Autres Cal.
FeN-RS (NM)	3.98	-	3.967 ^[8] 4.02 ^[9] 3.98 ^[10]
FeN-RS (F)	4.00 (1.26 μ_B)	-	4.021 ^[8] 4.11 ^[9] 3.99 ^[10]
FeN-RS (AF)	4.04 (1.98 μ_B)	4.50 ^[11] 4.52 ^[2] 4.50 ^[3]	4.00 ^[12] 4.20 ^[11] 3.99 ^[10]
FeN-ZB (NM)	4.25	4.33 ^[1] 4.35 ^[2] 4.307 ^[4] 4.33 ^[3]	4.36 ^[11] 4.195 ^[8]
CoN-RS (NM)	3.98	4.27 ^[5] 4.28 ^[6]	3.964 ^[8] 4.05 ^[13]
CoN-ZB (NM)	4.27	4.297 ^[7]	4.29 ^[13] 4.297 ^[14] 4.215 ^[8]
NiN-RS (NM)	4.02	-	4.06 ^[13]
NiN-ZB (NM)	4.34	-	4.32 ^[13,14]
CuN-RS (NM)	4.12	-	4.17 ^[13]
CuN-ZB (NM)	4.43	-	4.44 ^[13,14] 4.477 ^[15]

Les résultats de calculs des paramètres de réseau à l'équilibre des deux nitrures NiN et CoN sont portés dans la Table 1. Le paramètre de réseau calculé (4.02 Å) du nitrure NiN dans la structure RS à l'état NM est très proche de la valeur trouvée par Wang [13] qui est de 4.06 Å. De même, la valeur trouvée dans le cas de la structure ZB à l'état NM qui est de 4.34 Å est similaire à la valeur trouvée par Wang et Paduani [14] qui est de 4.32 Å. Dans le cas du nitrure de cuivre, nos résultats montrent un bon accord avec les résultats théoriques. Le paramètre de réseau de CuN (RS) à l'état NM est de 4.12 Å est presque identique au résultat trouvé par Wang qui est de 4.17 Å. La même remarque sera faite

pour le paramètre de réseau de CuN (ZB) à l'état NM, qui est de 4.34 Å, à comparer avec les résultats des auteurs Wang et Paduani (4.44 Å) [13-14] et Kanoun (4.477 Å) [15].

III.2. Propriétés optiques

Dans cette partie, nous allons présenter les résultats de calculs de la réponse optique des nitrures étudiés. L'analyse des densités d'états et des structures de bandes d'énergie nous permet d'identifier les origines des pics de la partie imaginaire de la fonction diélectrique.

Nous noterons les origines des pics d'absorption optique par $(X)\uparrow\downarrow_{l\rightarrow l'}$, où (X) désigne l'élément chimique : Fe, Co, Ni, Cu ou N et $\uparrow\downarrow$ indiquent la polarisation du spin, l et l' sont les symétries orbitales (s, p et d) des bandes initiale et finale impliquées dans les transitions.

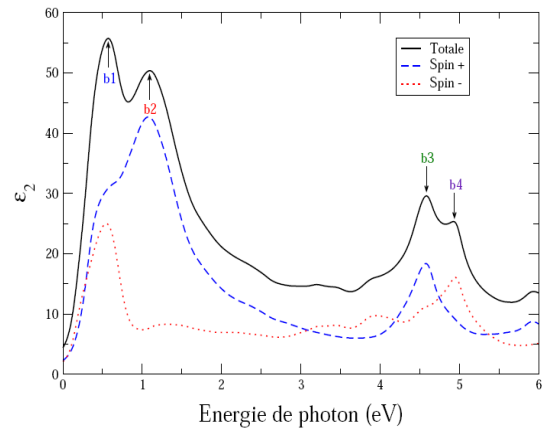


Fig. 3 Partie imaginaire de la fonction diélectrique du nitrure FeN dans la structure RS (F).

Comme la transition dipolaire électrique conserve le spin (les transitions se font entre électrons de même spin), nous avons tracé les réponses optiques correspondant aux électrons de spins $\uparrow$ et $\downarrow$. Nous donnons sur la Fig. 3, la partie imaginaire de la fonction diélectrique en fonction de l'énergie de photon (ω), du nitrure de fer à l'état F. Nous avons identifié quatre pics d'absorption, indiqués par b_1 , b_2 , b_3 et b_4 , situés aux énergies : 0.57, 1.08, 4.55 et 4.95 eV.

D'après la Fig. 4, il est clair que les pics b_1 et b_4 correspondent à des transitions électroniques de spin $\downarrow$ et les pics b_2 et b_3 aux transitions entre états de spin $\uparrow$. L'analyse des densités d'états partiels des atomes Fe et N (Fig. 4), montre que le pic situé à 0.57 eV est dû à une transition de

type $(\text{Fe})\downarrow_{d \rightarrow p}$, le deuxième pic situé à 1.08 eV, correspond aux transitions de type $(\text{N})_{p \rightarrow s}$. Les pics b_3 et b_4 contribuent aussi aux transitions de type $(\text{N})_{p \rightarrow s}$.

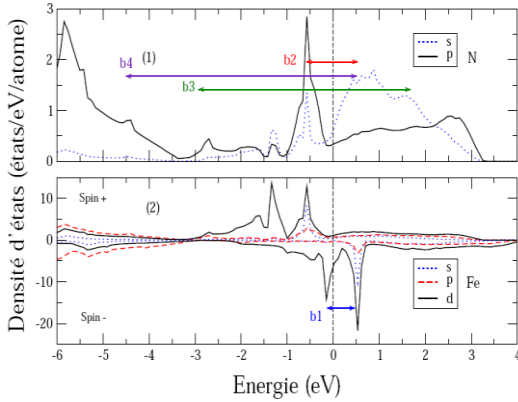


Fig. 4 Densités d'états projetées du nitrure FeN dans la structure RS (F) : (1) de N et (2) de Fe. Les flèches montrent les pics impliqués dans les transitions correspondantes.

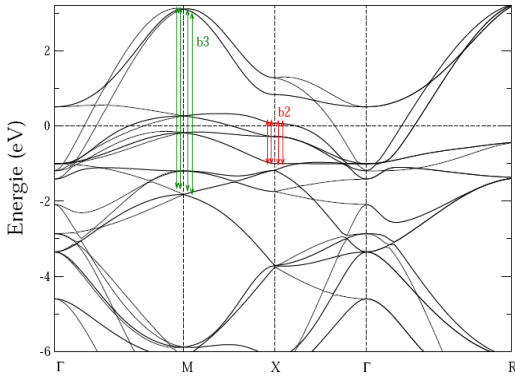


Fig. 5 Structures de bandes d'énergie du nitrure FeN dans la structure RS (F) (spin ↑), tracée selon les directions de haute symétrie. Les flèches indiquent les bandes et les régions impliquées dans la transition.

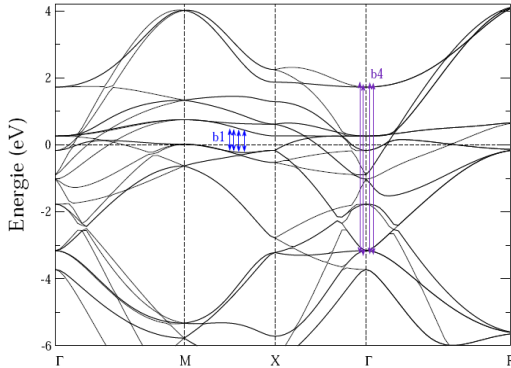


Fig. 6 Structures de bandes d'énergie du nitrure FeN dans la structure RS (F) (spin ↓), tracée selon les directions de haute symétrie. Les flèches indiquent les bandes et les régions impliquées dans la transition.

A partir de la structure de bandes d'énergie du FeN dans la phase F, des états de spins $\uparrow$ et $\downarrow$, donnés par les Fig. 5 et 6, respectivement, nous remarquons que les pics b_2 et b_3 correspondant aux transitions entre électrons de spin $\uparrow$ sont dus aux transitions entre bandes parallèles au voisinage des points de haute symétrie X et M, respectivement. Quant aux pics b_1 et b_4 ils sont dus à des transitions entre états de spin $\downarrow$, selon la direction $[\text{MX}]$ et autour du point Γ , respectivement.

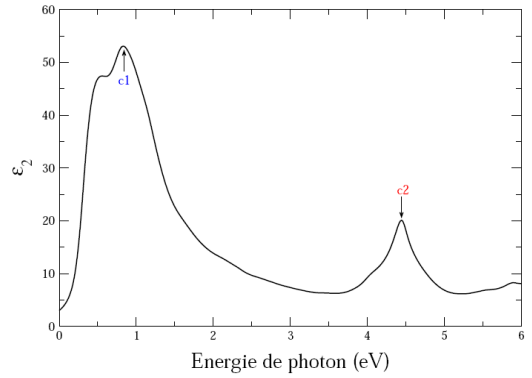


Fig. 7 Partie imaginaire de la fonction diélectrique du nitrure CoN dans la structure RS (NM).

Nous procéderons de la même manière pour traiter la réponse optique du nitrure CoN à l'état NM qui est donnée sur la Fig. 7. La courbe montre l'existence de deux pics d'absorption : un, situé à 0.84 eV noté par c_1 et l'autre situé à 4.45 eV noté c_2 .

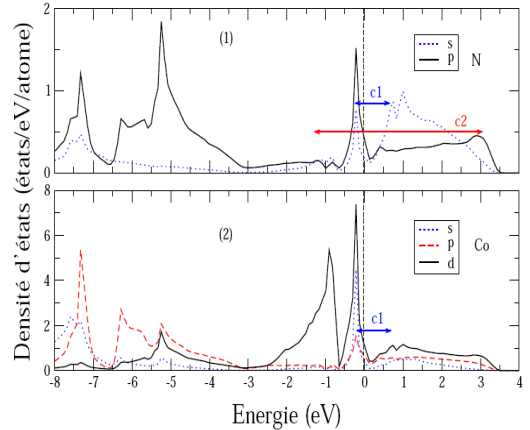


Fig. 8 Densités d'états projetées du nitrure CoN dans la phase RS (NM) : (1) de N et (2) de Co. Les flèches montrent les pics impliqués dans les transitions correspondantes.

L'analyse des densités d'états partielles des atomes Co et N, données par la Fig. 8, indique que le premier pic est dû à des transitions de

types $(Co)_{p \rightarrow d}$ et $(N)_{s \leftrightarrow p}$, le deuxième pic correspond à des transitions de type $(N)_{s \rightarrow p}$. A partir des structures de bandes d'énergie, nous avons constaté que les deux pics c_1 et c_2 proviennent des transitions entre bandes parallèles autour des points W et L de la zone de Brillouin, respectivement.

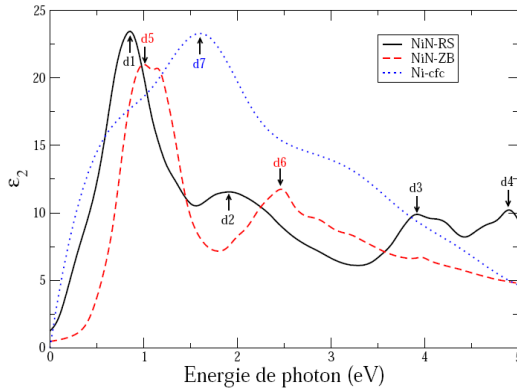


Fig. 9 Partie imaginaire de la fonction diélectrique du nitrure NiN des phases RS et ZB et du nickel cfc.

La fonction diélectrique $\epsilon_2(\omega)$ du nitrure de nickel dans les phases RS et ZB, est donnée par la Fig. 9. Elle montre l'existence de quatre pics d'absorption, situés à 0.86, 1.92, 3.93 et 4.90 eV, notés respectivement par d_1 , d_2 , d_3 et d_4 , dans la structure RS. Quand à la structure ZB, elle présente seulement deux pics, notés par d_5 et d_6 , situés à 1.00 et 2.48 eV, respectivement. Nous avons aussi représenté dans la même figure, le spectre optique du nickel à l'état massif. En comparant les trois courbes, nous pouvons dire que l'azote enrichit le spectre optique du composé NiN et réduit la largeur du pic principal.

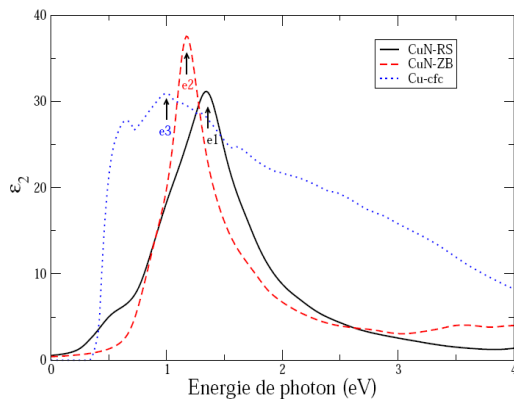


Fig. 10 Partie imaginaire de la fonction diélectrique du nitrure CuN des phases RS et ZB et du cuivre cfc.

Les densités d'états partielles des atomes Ni et N du système NiN dans la structure RS, ont indiqué que les pics d_1 , d_2 et d_3 sont dus aux transitions intrabandes dans l'azote, de type $(N)_{s \rightarrow p}$, le pic d_4 provient d'une transition de type $(N)_{p \rightarrow s}$. Alors que les pics d_5 et d_6 , observés dans la structure ZB, sont également dus aux transitions intrabandes dans l'azote ; elles sont de type $(N)_{s \rightarrow p}$.

Les courbes des constantes diélectriques ϵ_2 données en fonction de l'énergie de photon ω , du nitrure CuN des structures RS et ZB et du cuivre pur, sont données par la Fig. 10. Elles montrent l'existence d'un seul pic d'absorption: dans la structure RS, il est noté par e_1 et situé à 1.36 eV. Dans la structure ZB, le pic est situé à 1.19 eV et noté par e_2 . A partir des densités d'états partielles des atomes Cu et N, nous avons noté que les deux pics e_1 et e_2 sont dus à des transitions électroniques de type $(N)_{s \rightarrow p}$. Dans le spectre du cuivre à l'état massif, nous avons également remarqué un seul pic noté e_3 , situé à 1 eV. La comparaison avec le spectre optique du cuivre pur, montre que l'abaissement du seuil d'absorption optique observé dans CuN, est suivi par une amélioration de la résolution comme le montrent les valeurs de la largeur à mi-hauteur : 0.5, 0.7 et 2.5 eV pour CuN (ZB), CuN (RS) et Cu-cfc, respectivement.

IV. Conclusions

Nous avons calculé les propriétés structurale et magnétique des nitrures FeN, CoN, NiN et CuN dans le cas de deux types de structure RS et ZB.

Nos résultats montrent que FeN est plus stable dans la structure RS ferromagnétique avec un paramètre d'équilibre 4.04 Å et un moment magnétique 1.26 μ_B sur l'atome de fer, alors que la structure ZB est non magnétique à 4.25 Å. Les nitrures CoN, NiN et CuN sont stables dans l'état non magnétique de la structure RS ayant les paramètres de réseau suivant : 3.98 Å, 4.02 Å et 4.12 Å, respectivement.

L'étude des propriétés optiques des quatre nitrures, montre l'apparition d'un pic principal, qui se répète dans les courbes de la partie imaginaire de la fonction diélectrique. Nous avons remarqué que ce pic est essentiellement dû à des transitions électroniques ayant lieu dans les atomes du métal de transition dans FeN et CoN, avec une contribution non négligeable de l'atome d'azote. Par contre, dans le cas des composés

NiN et CuN, c'est plutôt l'atome d'azote qui est à l'origine de ce pic. Nous avons aussi remarqué une diminution du nombre de pics d'absorption en fonction du numéro atomique du métal de transition de la série 3d.

References

- [1] H. Nakagawa, S. Nasu, H. Fujii, M. Takahshi, F. Kanamaru, ^{57}Fe Mössbauer study of FeN_x ($x=0.25\sim 0.91$) alloys, *Hyperfine Interactions* 69 (1991) 455-458.
- [2] L. Rissanen, P. Schaaf, M. Neubauer, K. -P. Lieb, J. Keinonen, T. Sajavaara, The production of the new cubic FeN phase by reactive magnetron sputtering, *Applied Surface Science* 138-139 (1999) 261-265.
- [3] T. Hinomura, S. Nusa, A study of Fe-N alloys systems, *Hyperfine Interactions* 111 (1998) 221-226.
- [4] K. Suzuki, A. Morita, T. Kaneko, H. Yoshida, H. Fujimori, Crystal structure and magnetic properties of the compound FeN, *Journal of alloys and compounds*. 201 (1993) 11-16.
- [5] O. Shmitz-Dumont, N. Kron, Bei thermischem abbau von kobalt (III)-amid entstehende kobaltnitride, *Angewandte Chemie* 67 (1955) 231-232.
- [6] B. J. Taylor, V. Frask, The thermal decomposition of solid hexaamminecobalt (III) azide, *Inorganic chemistry* 2 (1963) 334-336.
- [7] K. Suzuki, T. Kaneko, H. Yoshida, H. Morita, H. Fujimori, Crystal structure and magnetic properties of the compound CoN, *Journal of alloys and compounds* 224 (1995) 232-236.
- [8] P. Lukashev, W. R. L. Lambrecht, First-principles study of the preference for zinc-blende or rocksalt structures in FeN and CoN, *Physical Review B* 70 (2004) 245205-7.
- [9] A. Houari, S. F. Matar, M. A. Belkir, Ab initio investigation of the electronic structure and the magnetic trends within equiatomic FeN, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 312 (2007) 298-304.
- [10] A. Filippetti, W. E. Pickett, Prediction of a ferromagnetic ground state for NaCl-type FeN, *Physical Review B* 59 (1999) 8397-8400.
- [11] Y. Kong, Electronic structure and magnetism of equiatomic FeN, *Condensed Matter* 12 (2000) 4161-4173.
- [12] H. Shimizu, M. Shirai, N. Suzuki, theoretical investigation of magnetic structure and hyperfine field of NaCl-type FeN, *Journal of the Physical Society of Japan*. 67 (1998) 922-926.
- [13] H. Wang, Xue De-Sheny, Electronic structures and magnetic properties of CoN, NiN and CuN, *Chin. Phys. Lett* 21 (2004) 1612-1615.
- [14] C. Paduani, Bans structure of the mononitrides CoN, NiN and CuN in the zincblende structure, *Solid State Communications* 148 (2008) 297-300.
- [15] M. B. Kanoun, S. Goumri-Said, Investigation of structural stability and electronic properties of CuN, AgN, and AuN by first principles calculations, *Physics Letters A* 362 (2007) 73-83.
- [16] O. K. Andersen, Linear methods in band theory, *Physical Review B* 12 (1975) 3060-3083.
- [17] W. Khon, L. J. Sham, Self-consistent equation including exchange and correlation effects, *Physical Revue A* 140 (1965) 1133-1138.
- [18] O. Jepsen and O. K. Anderson, The electronic structure of hcp ytterbium, *Solid State Communication* 9 (1971) 1763-1767.
- [19] M. A. Khan, C. Koenig, R. Riedinger, Interband dielectric constants in antiferromagnetic, ferromagnetic and paramagnetic phases of FeRh, *J. Phys. F: Met. Phys* 13 (1983) L159-L164.
- [20] C. Koenig, M. A. Khan, Self-consistent electronic structure of FeAl, *Physical Review B* 27 (1983) 6129-6135.
- [21] A. Ziane, S. Bouarab, Optical anisotropy and parallel energy bands in Au (110) and Cu (110) surfaces, *Physical Review B* 67 (2003) 235419-5.