	REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE **Université Djilali Liabès de Sidi Bel Abbès**

Fiche de Présentation
Thèse de Doctorat / Mémoire de Magister

Type de la PG نوع ما بعد التدرج	Doctorat en Sciences
اســــم و لقــب الطـــــــالب	عز وز محمد
Nom et Prénom de l'étudiant	AZZOUZ Mohamed
e-mail de l'étudiant / البريد الالكتروني للطــالب	azzouzmohamed22@yahoo.fr
Numéro de téléphone de l'étudiant / رقم هاتـف الطـالب	0542161391
Spécialité / التـــخصص*	Physique
Option / الفـــرع*	Science et génie des matériaux
Intitulé de la thèse / mémoire عنـــوان الأطروحة / المذكـــرة	La structure électronique et magnétique de l'alliage pérovskite $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$: Étude de premier principe

Nom et Prénom de l'encadreur **اســـــم و لقــب المؤطـــــر**	KACIMI Salima
Date de soutenance **تاريخ المناقشة**	01 Juillet 2015
Les mots clés **الكلمات المفتاحية** **keys word**	Structure, électronique, Pérovskites, LSDA+*U,* $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$,

الملخص (بالعربية) :

محتوى هذه الرسالة يقو م علي استخدام تقنية التجزئة الأحادية للمصفوفة في نظام متعدد المستخدمين للإرسال و الاستقبال و الرصد واستعمال مصفوفة معالجة المعلومة ما قبل الإرسال و ما بعد الاستقبال في نظام البث ألمهبطي للهواتف النقالة. بالإضافة إلي ذلك يتم استعمال نظام الشيفرة الزمكاني بإدماجه مع نظام تعدد الموجات الحاملة التعامدية حيث نقوم كذلك باقتراح نظام التشفير علي مستوي قاعدة البث والإرسال. هاتان التقنيتان تقومان بالأساس علي توفر معلومة تقنية حول قنوات البث لجميع مستخدمي شبكة الهاتف النقال علي مستوي قاعدة البث و الإرسال لكن يتم تجزئة قناة كل مستخدم علي حدي و التي تتمثل في قناة متعددة الإرسال و الاستقبال لجميع المستخدمين إلي قنوات فرعية متوازية و مستقلة. بعد ذلك تتم مقارنة التقنيتان الهجينتان مع تقنية التشفير الزمكاني العمودي الطبقي. نتائج المحاكاة أظهرت أن معالجة المعلومة ما قبل الإرسال بتقنية الإجبار الصفري أفضل من تقنية الرصد بنظام الشيفرة الزمكاني العمودي و تقنية التشفير عند البث و الإجبار الصفري عند الاستقبال في قنوات الانتقاء الترددي. إذن هذه التقنية تقوم باستغلال التعدد الزمني و المكاني والترددي للإرسال.

Résumé (Français et/ou Anglais) :

Le calcul de la structure électronique basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité avec l'approximation de la densité locale de spin plus la correction Hubbard-*U* (LSDA+*U*) pour les alliages pérovskites $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$ avec les concentrations du gadolinium (Gd) variant de 0% à 100% ont été réalisées en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total. Les stabilités structurales et magnétiques de $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$ ont été abordées. Les calculs LSDA+*U* montrent que pour la concentration du gadolinium (Gd) $x \leq 0{,}676$, la structure favorisé est une phase cubique ferromagnétique, tandis que pour la concentration du gadolinium (Gd) $x \geq 0.676$, la phase orthorhombique antiferromagnétique est favorisée. Les propriétés de l'état fondamentales calculées, la constante d'équilibre de réseau, le module de compressibilité sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Nos résultats montrent que les trous introduits par la substitution de l'atome Sr dans une structure orthorhombique a principalement le caractère 3*d* du Fe, qui sont responsables de la réduction de l'énergie gap. Grâce aux calculs DOS, tous les alliages cubiques sont trouvés des métaux sauf pour la concentration $x = 0{,}125$ où le matériau adopte le caractère demi-métal.

Electronic structure calculations based on density-functional theory with the local spin densityapproximation with Hubbard-U corrections (LSDA+U) for $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$ perovskite alloys with gadolinium (Gd) concentrations varying from 0% up to 100% have been performed using the accurate full-potential linearized augmented plane wave method. The structural and magnetic stabilities of $Gd_xSr_{1-x}FeO_3$ were addressed. LSDA+*U* calculations show that for gadolinium (Gd) concentration $x \leq 0.676$, the favored structure is a ferromagnetic cubic phase, while for gadolinium (Gd) concentration $x \geq 0.676$, the favored structure is an antiferromagnetic orthorhombic phase. The calculated ground state properties, the equilibrium lattice constant, bulk modulus are in good agreement with experimental results. Our results show that the holes introduced by Sr substitution in an orthorhombic structure have mainly Fe 3*d* character, which are responsible for the reduction of the bad gap. Through the DOS calculations, all cubic alloys are founded metals except for the concentration $x = 0.125$ where the material adopts the half-metallic character.