

AMARI SIHEM

Intitulée : Etude de premier-principes des propriétés électroniques et magnétiques des alliages chalcopyrites CdXO₂ (X=Mn,Fe, Co et Cr).

Spécialité : Physique

Option : Sciences et Génie des Matériaux

e-mail : siham_amari@yahoo.fr

Résumé

En utilisant la méthode de premiers principes, nous étudions les propriétés électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués CdTMO₂ avec TM = Cr, Mn, Fe Co et Ni. Les calculs sont effectués par la méthode des ondes planes linéairement augmentées et a potentiel total plus les orbitales locales (FP-L/APW+lo), basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Comme potentiel d'échange et de corrélation nous avons utilisé les deux approximations GGA et GGA+U. Les propriétés structurales sont déterminées à partir des calculs d'énergie totale dans la structure chalcopyrite. Nous présentons une étude comparative entre les structures électronique, les densités d'états totales et partielles et des moments locaux calculés par la GGA et GGA+U. Nous avons prédit l'énergie de séparation d'échange de spin des états 3d des métaux de transition $\Delta x(d)$, l'énergie d'échange des états p et d $\Delta x(pd)$ et les constantes d'échange $N_{0\alpha}$ et $N_{0\beta}$.

Abstract

Using the first-principles method, we investigate the electronic and magnetic properties of the diluted magnetic semiconductors CdTMO₂ with TM= Cr, Mn, Fe Co and Ni. The calculations are performed by a developed full-potential augmented plane wave plus local orbitals (FP-L/APW+lo) method within the spin density functional theory. As exchange-correlation potential we used the generalized gradient approximation GGA form and GGA+U. Structural properties are determined from the total energy calculations in chalcopyrite structure. We present a comparative study between the electronic structures, total and partial densities of states and local moments calculated within GGA and GGA+U. Furthermore, we predict the values of spin-exchange splitting energies $\Delta x(d)$ and $\Delta x(p-d)$ and exchange constants $N_{0\alpha}$ and $N_{0\beta}$ produced by the transition metal 3d states.

ملخص

باستعمال طريقة المبادئ الأولية، درسنا الخصائص الإلكترونية و المغناطيسية لأشباه الموصلات المغناطيسية المخففة CdTMO₂ (TM = Cr, Mn, Fe, Co و Ni). اجريت الحسابات باستعمال طريقة (FP-L/APW+lo) full-) potential augmented plane wave plus local orbitals ضمن نظرية الكثافة الدالية مع أخذ السبين بعين الاعتبار. من أجل كمون التبادل-ارتباط، استخدمنا تقريب التدرج المعمم GGA و GGA+U. الخصائص البنيوية عينت من حسابات الطاقة الكلية في بنية الكوبرايت. قدمنا دراسة مقارنة بين البنيات الإلكترونية، كثافة الحالات الكلية و الجزئية و العزم الموضعي المحسوبة بطريقة GGA و GGA+U. علاوة على ذلك، تنبأنا بقيمة طاقة التجزئة سبين-تبادل $\Delta x(d)$ و ثوابت التبادل $N_{0\alpha}$ و $N_{0\beta}$ الناتجة عن حالات 3d للمعادن الانتقالية.