

Nom et Prénom: MOULAY Nouredine

Titre du sujet : Etude ab-initio des propriétés magnétiques des composés intermétalliques R_xFe_y ($x = 1,2$; $y = 2 \dots 17$; $R =$ hydrures, borures, carbures, nitrures de composés rares-éléments de transitions 3d).

Spécialité : Physique

Option : Physique des Matériaux Magnétiques

E.mail: n_moulay@hotmail.com

Abstract

Based on first principles full potential linear muffin-tin orbital method within the spin polarized local density approximation, we have studied the structural, elastic, electronic, magnetic and optical properties and the behavior under pressure on the magnetic moments per atoms from 0 to 85 GPa for YFe_2 , $NiFe_2$ and $YNiFe_4$ intermetallic. The magnetic per formula unit value and equilibrium lattice constant of YFe_2 are calculated and compared with experimental data and theoretical results. However, this is the first predictive calculations for the structural and magnetic properties for $NiFe_2$ and $YNiFe_4$ compounds. From the computed elastic constants, theoretical value of Young's modulus, Shear modulus, Poisson's ratio and Lamé's coefficients, sound velocities and Debye temperature are evaluated. Our results demonstrate that $NiFe_2$ in C15 phase, YFe_2 and $YNiFe_4$ in C15b phase are mechanically stable with the large bulk moduli $B_0 = B_{VR}$ for alloys containing atom Ni ($NiFe_2 = 224.7$ GPa and $NiYFe_4 = 192.0$ GPa). The calculated of total and partial density of state shows strong hybridization at Fermi level with a complex behavior of d character. Finally, we have calculated the dielectric function, refractive index, reflectivity and the absorption coefficient for the three compounds. These shows almost the same spectrum behavior by the minimal difference in refractive index ($NiFe_2 = 3.96$, $YFe_2 = 2.76$ and $YNiFe_4 = 4.7$). These confirm the refractor nature of these intermetallic compounds.

Résumé

Nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques, électroniques, magnétiques et optiques et le comportement sous pression des moments magnétiques par atome entre 0 jusqu'à 85 GPa pour les intermétalliques YFe_2 , $NiFe_2$ and $YNiFe_4$ en se basant sur la méthode linéaire des orbitales muffin tin avec un potentiel total (FP LMTO) en utilisant l'approximation de la densité locale avec polarisation du spin. Le moment magnétique par unité formulaire ainsi que le paramètre de maille du composé YFe_2 sont calculés et comparés avec d'autres résultats expérimentaux. Cependant, ce sont les premiers calculs prédictifs pour les propriétés structurales et magnétiques pour les deux composés intermétalliques $NiFe_2$ et $YNiFe_4$. A travers le calcul des constantes élastiques, nous avons pu évalué le module de Young, le module de cisaillement, le rapport de poisson, les coefficients de lamé ainsi que les vitesses du son et la température de Debye. Nos résultats montrent que le composé $NiFe_2$ et YFe_2 dans la phase C15 et $YNiFe_4$ dans la phase C15b sont mécaniquement stable avec un large bulk modulus $B_0 = B_{VR}$ pour les composés contenant l'atome Ni ($NiFe_2 = 224.7$ GPa et $NiYFe_4 = 192.0$ GPa). Le calcul de la densité d'état total et partiel montre une forte hybridation au niveau de Fermi avec une complexité dans le comportement du caractère d. Finalement, nous avons calculé la fonction diélectrique, indice de refraction, la réflectivité et le coefficient d'absorption pour les trois composés intermétalliques. Les spectres montrent un comportement presque le même par différence minimale dans les valeurs des indices de refraction ($NiFe_2 = 3.96$, $YFe_2 = 2.76$ et $YNiFe_4 = 4.7$). Ceux-ci confirment la nature réfractrice de ces composés intermétalliques.

ملخص

لقد درسنا الخصائص الهيكلية، الإلكترونية، المغناطيسية وخصائص المرونة ومدى تأثير الضغط على العزم المغناطيسي لكل ذرة ما بين 0 و 80 GPa للمواد المغناطيسية الثنائية والثلاثية، $NiFe_2$ ، $YNiFe_4$ باستخدام طريقة FPLMTO مع استخدام الطريقة التقريبية للكثافة المحلية مع الاستقطاب LSDA. إنها أول دراسة تنبؤية بالنسبة للمواد $YNiFe_4$ ، $NiFe_2$. عبر حساب خصائص المرونة تمكنا من تقييم وحدة YOUNG، وحدة الجز (Cisaillement). نسبة بواسون (Poisson) ومعامل Lamé وبالتالي سرعات الضوء ودرجة حرارة Debye. هذه النتائج تبين بأن المواد المغناطيسية في الهياكل C15 و C15b هم مستقرين ميكانيكيا مع (Bulk modulus) واسع $B_0 = B_{VR}$ للمواد حاملة الذرة Ni ($NiFe_2 = 224,5$ GPa، $YNiFe_4 = 192,0$ GPa) حساب الكثافة العامة والجزئية يوضع تهجين قوي عند مستوى Fermi مع التعقيد في سلوك حالة D. وأخيرا تمكنا من حساب وظيفة العازل، معامل الانكسار، الانعكاس ومعامل الامتصاص للمواد الثلاثة. الأطياف تظهر تقريبا نفس السلوك مع اختلاف طفيف في قيم معاملات الانكسار ($NiFe_2 = 3,96$ ، $YNi_2 = 2,76$ ، $YNiFe_4 = 4,7$). هذه تؤكد طبيعة الانكسار عند هذه المركبات.