

Nom : Moussa

Prénom : Mohamed El Amine

Mail : moussamed2007@yahoo.fr

Spécialité : Physique

Option : Sciences et Génie des Matériaux

Intitulée : *Étude ab-initio de la structure électronique des composés de type ABO_4 ($A=$ élément trivalent; $B=$ métal de transition)*

Résumé

Nous rapportons la structure cristalline, les stabilités de phase magnétiques et les propriétés électroniques des composés RVO_4 ($R = \text{Eu, Ho, Lu}$) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées afin d'examiner les effets des configurations d'ions R . La structure électronique de toutes les ortho-vanadates est étudié dans la structure de type zircon. La $DFT+U$ prédit un état fondamental isolant antiferromagnétique et non magnétique, qui est en bon accord avec les observations expérimentales. Nos résultats indiquent que le niveau de Fermi est largement dominé par les orbitales atomiques de l'ion vanadate, mais la substitution du cation influe sur ces états électroniques. En générale, l'approche $DFT+U$ est apte pour décrire les matériaux à électrons fortement corrélés.

Abstract

We report on the crystal structure, magnetic phase stabilities and electronic properties of RVO_4 ($R = \text{Eu, Ho, Lu}$) compounds in the framework of the density functional theory using the linearized-augmented-plane-wave method in order to examine the effects of the R ion configurations. The electronic structure of all ortho-vanadates is studied in zircon-type structure. $DFT+U$ predict an anti-ferromagnetic and nonmagnetic insulating ground state, which is in agreement with experimental observations. Our results indicate that the Fermi level is largely dominated by atom orbitals of the vanadate ion, but cation substitution influences these electronic states. Overall, $DFT+U$ approach holds promise in enabling accurate calculations of strongly correlated electron materials.

المخلص

نقدم في هذا العمل التركيب البلوري, الاستقرار المغناطيسي و الخصائص الالكترونية لمركبات RVO_4 في نطاق نظرية الكثافة الوظيفية باستخدام النهج $LDA+U$ لدراسة اثار تكوينات الايون R . يتم دراسة البنية الالكترونية لجميع الارثوفانادات في البنية من نوع زركونيا. حسابات $DFT+U$ تتنبأ بايجاد عازل مضاد عالي النفاذية و غير مغناطيسي, والتي تتوافق جيدا مع الملاحظات التجريبية. تشير نتائجنا إلي أن مستوى فيرمي يهيمن عليه المدارات الذرية للايون فانادات, و لكن استبدال الكاتيون يؤثر على الحالات الالكترونية. بشكل العام, النهج $DFT+U$ قادر على وصف المواد ذات الالكترونات المتطابقة بقوة.