

Nom : ZEGAOU

Prénom : BOUDJELAL

Sujet intitulé : «*Etude des propriétés électroniques, structurales et magnétiques des composés à base de Gadolinium*».

Email : adjalil2006@yahoo.fr

Tel : 0561597461 ou 0793521235

Résumé

Cette thèse présente une étude modélisatrice des propriétés structurales, électroniques et magnétiques de quelques composés intermétalliques terre rares-métaux de transition GdX_2 ($X=Fe, Co, Ni$), qui présentent un intérêt à la fois fondamental et appliqué.

Les propriétés électroniques et magnétiques des composés intermétalliques, ferrimagnétique GdX_2 laves-phase ($X = Fe, Co$ et Ni), ont été calculées en utilisant la méthode des orbitales muffin-tin linéarisées avec un potentiel total (FP-LMTO) dans les deux approximations GGA et GGA+U. La méthode dite GGA + U est appliquée pour traiter correctement les électrons $4f$ de Gd dans le calcul de la structure électronique. L'approximation GGA améliore l'accord entre les calculs pour les constantes de réseau et ceux de l'expérimentales; par contre l'approximation GGA + U les surestime, mais elle donne une meilleure représentation de la structure de bande, densité d'états et les moments magnétiques par rapport à la GGA seule. La réduction des moments magnétiques de Co et Ni dans les composés $GdCo_2$ et $GdNi_2$ par rapport à celle des métaux purs est due à la différence de résistance à la localisation du métal de transition et pour la même raison de l'énorme réduction des températures de Curie.

Abstract

This thesis presents an *ab initio* study of structural, electronic and magnetic properties for intermetallic compounds of rare earth-transitions metals, GdX_2 ($X=Fe, Co, Ni$). These compounds are interesting from both a fundamental and an applied point of view.

The electronic and magnetic properties of the ferromagnetic laves-phase GdX_2 ($X = Fe, Co$ and Ni) intermetallic compounds were calculated by using an all-electron full-potential linear muffin-tin orbital method (FP-LMTO) within GGA and GGA + U. The so-called GGA + U method is applied to properly treat the Gd- $4f$ electron in the electronic structure calculation. The GGA improves the agreement between experiments and calculations for the lattice constants; however the GGA + U overestimates them, but gives a better representation of the band structure, density of states and magnetic moments compared to GGA alone. The reduction of the Co and Ni magnetic moments in the $GdCo_2$ and $GdNi_2$ compared to that in pure metals is due to the different localization strength of the transition metal and the same reason in the enormous reduction of the Curie temperatures.

ملخص

هذه الأطروحة تمثل دراسة من نجة للخصائص البنيوية، الإلكترونية والمغناطيسية لمركبات السبائك المكونة من GdX_2 (حيث $X =$ الحديد، الكوبالت والنيكل). هذه المركبات من وجهة نظر ذات أهمية أساسية وتطبيقية.

تمّ حساب الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية لمركبات السبائك GdX_2 (حيث $X =$ الحديد، الكوبالت والنيكل) باستخدام الطريقة (FP-LMTO) التي تعتمد على الطرق التقريبية (GGA و U + GGA). الطريقة المسماة (U + GGA) مخصصة للمعالجة الصحيحة لإلكترونات الطبقة $Gd-4f$ في حساب البنية الإلكترونية التركيب الإلكتروني.

الطريقة التقريبية GGA يحسن الاتفاق بين الحساب في قياس ثوابت الشبكة البلورية مع تلك المقاسة تجريبيا ولكن الطريقة التقريبية (U + GGA) تغالي في ذلك، ولكنها تعطي تمثيل أفضل لبنية عصابات الطاقة، كثافة الحالات والعزوم المغناطيسية مقارنة مع (GGA) عند تطبيقها بمفردها. الانخفاض في قيمة العزم المغناطيسي لكل من الكوبالت Co والنيكل Ni في السبائك $GdNi_2$ و $GdCo_2$ مقارنة بما كان عليه في المعادن النقية Co و Ni راجع لمختلف القوى الداخلية للمعادن الانتقالية ونفس السبب في الحد الهائل من درجات حرارة كوري.