

Thèse de doctorat en physique intitulée:

Etude des structures électroniques de type RT_2X_2 (Avec R=Terre Rare, T=Métal de Transition)

Par : RIGHI Haroun

E-mail : righiharoun@gmail.com,

ملخص:

في هذه الأطروحة تم حساب خصائص المرونة، الخصائص الإلكترونية، الحرارية والمغناطيسية للمركبات الثلاثية RT_2X_2 ذات البنية $ThCr_2Si_2$ ($I4/mmm D_{4h}^{17}$) بطريقة FP-LMTO. تم حساب طاقة التبادل-إرتباط بواسطة طريقة كثافة اللف الموضعية (LSDA) حسب تقريب Perdew-Wang بالإضافة لذلك قمنا بإدخال كمون التفاعل الكولومبي U (LSDA+U) لتحسين حسابات نطاقات الطاقة، كثافة الحالات الطاقية و الخصائص المغناطيسية. نتائج حساب معاملات بنية الشبكة البلورية توافق بشكل جيد النتائج العملية. توقعات ثوابت المرونة C_{ij} تمت باستعمال تقنية تغير الطاقة الكلية بالنسبة للتشوهات. معامل الإنضغاط، معامل يونغ، معامل القص، نسبة بواسون و درجة حرارة ديباي استنتجت من حسابات ثوابت المرونة C_{ij} . تمت دراسة الطبيعة الميكانيكية لهذه المواد من خلال تحليل النتائج. مناقشة نتائج الخصائص المغناطيسية و الإلكترونية للمركبات من خلال حساب نطاقات الطاقة و كثافة الحالات الإلكترونية.

قمنا بحساب الخصائص الحرارية لهذه المواد باستعمال النموذج الشبه التوافقي لديباي. سمح لنا هذا النموذج بالحصول على تقريب جيد لتغيرات معامل الإنضغاط، معاملات بنية الشبكة البلورية، السعات الحرارية و درجة ديباي بدلالة الضغط و الحرارة.

Résumé :

Les propriétés structurales, élastiques, thermodynamiques, électroniques et magnétiques des composés ternaires RT_2X_2 de structure isotype $ThCr_2Si_2$ (espace de groupe $I4/mmm$, D_{4h}^{17}) ont été calculées en utilisant la méthode FP-LMTO (full-potential linear muffin-tin orbital). Le traitement de l'énergie d'échange et de corrélation est effectué par l'approximation de la densité locale de spin suivant l'approche de Perdew et Wang (LSDA-PW). En outre, nous avons ajouté le potentiel d'interaction coulombienne U (Méthode LSDA+ U) pour améliorer le calcul des structures de bandes électroniques et les propriétés magnétiques. Les paramètres de structure calculés sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Les constantes élastiques C_{ij} sont prédites en utilisant la technique de variation de l'énergie totale en fonction de la déformation. Les modules de l'élasticité du polycristallin comme le module de cisaillement, le module de Young, le rapport de Poisson et la température de Debye sont dérivés des constantes d'élasticité monocristalline obtenues. Le comportement ductile de ces composés est étudié à travers l'interprétation des résultats obtenus des constantes C_{ij} . À travers le calcul des bandes d'énergie et les densités des états électroniques de ces composés, les propriétés électroniques et magnétiques sont discutées.

Nous avons prédit les propriétés thermodynamiques de ces composés en utilisant le modèle quasi-harmonique de Debye. La variation du module de compressibilité, les paramètres de mailles, les capacités calorifiques et la température de Debye en fonction de la pression et de la température sont obtenus avec succès.

Abstract

The structural, elastic, thermodynamic, electronic and magnetic properties of compounds RT_2X_2 with the tetragonal $ThCr_2Si_2$ structure (space group $I4/mmm D_{4h}^{17}$) have been calculated using the full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method. The exchange–correlation potential is treated within the local spin density approximation of Perdew and Wang (LSDA–PW). Moreover, we have added the Coulomb interaction U to improve the electronic band structure calculations and the magnetic properties. The calculated structural parameters are in good agreement with the experimental data. The elastic constants C_{ij} are predicted using the total energy variation versus strain technique. The polycrystalline elastic moduli, namely; shear modulus, Young’s modulus, Poisson’s ratio, and Debye temperature are derived from the obtained single-crystal elastic constants. Ductility behavior of these compounds is interpreted via the calculated elastic constants C_{ij} . Electronic and magnetic properties are discussed from the calculations of band structure and density of states.

The thermodynamic properties are predicted through the quasi-harmonic Debye model, in which the lattice vibrations are taken into account. The variation of the bulk modulus, lattice constant, heat capacities and Debye temperature with pressure and temperature are successfully obtained.