

mekamdjamila@yahoo.fr

Abstract

First Part

The electronic and magnetic structures of orthorhombic perovskites $RE-TM-O_3$ ($RE = \text{Eu, Gd, Tb}$ and $RE = \text{Mn, Fe, Co}$) are studied using *ab initio* density functional theory in the local density approximation (LDA) with the on-site Hubbard U_{eff} parameter (LDA+ U). To show rare earth (RE) and transition metal (TM) cations effect, we have analyzed the structural parameters, charge and spin densities and partial densities of states. We have also show how the results can be made relatively sensitive to the choice of cation and to ion size. Valence electronic structures obtained from subsequent LDA+ U calculations are compared and discussed.

Second part

The electronic structure of cubic inverse perovskites Gd_3MX ($M = \text{Al, Ga}$ and In ; $X = \text{B, C, N}$ and O) are investigated with the first-principles method. The ground-state structure, equilibrium structural parameters, and magnetic structure are calculated and the comparison between these compounds is realized. The electronic structures reveal that all these compounds have a metallic character. We report a detailed analysis of the different physical properties and their changes induced by varying the cation and/or the anion.

Résumé

Première Partie

Les structures électroniques et magnétiques des pérovskites orthorhombiques de type $RE-TM-O_3$ ($RE = \text{Eu, Gd, Tb}$ et $TM = \text{Mn, Fe, Co}$) sont étudiés en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité à travers l'approximation LDA+ U . Pour montrer l'effet des cations de l'élément terre rare (RE) et de métal de transition (TM), nous avons analysé les paramètres structuraux, les densités de charge et de spin et les densités d'états partielles. Nous avons également montrer comment les résultats peuvent être sensibles au choix du cation et de la taille des ions. Les structures électroniques de valence obtenues à partir de calculs LDA+ U sont comparées et discutées.

Deuxième Partie

La structure électronique des pérovskites inverses cubiques Gd_3MX ($M = \text{Al, Ga}$ et In ; $X = \text{B, C, N}$ et O) sont étudiés avec une méthode du premier principe. La structure de l'état fondamental, les paramètres structuraux d'équilibre et la structure magnétique sont calculés et la comparaison entre ces composés est réalisée. Les structures électroniques révèlent que tous ces composés ont un caractère métallique. Nous rapportons une analyse détaillée des différentes propriétés physiques et leurs évolutions induites par la variation du cation et / ou de l'anion.