

Présentée par : DRIEF Faiza

Spécialité : Physique

Option : Sciences des Matériaux

Intitulée : Magnétisme et supraconductivité dans les pnictides de Fer: Étude de premier principe.

Soutenue le 13/11/2014

Devant le jury composé de :

Président : BOUHAFS Bachir Prof. (U. Djillali Liabes-Sidi Bel Abbès)

Examineurs :

BOUKORTT Abdelkader Prof. (U. de Mostaganem)

BERRAH Ismail Prof. (U. de Bejaia)

KACIMI Salima Prof. (U. Djillali Liabes-Sidi Bel Abbès)

SAIDI Nawel MCA (U. de Mostaganem)

Directeur de thèse :

ZAOUI Ali Prof. (U. Djillali Liabes-Sidi Bel Abbès)

e-mail : dftdrief@gmail.com

Résumé

Nous présentons une étude de la théorie fonctionnelle de densité de la structure électronique des composés de pnicture de fer EuFe_2M_2 ($M = \text{As}, \text{P}$) et leurs alliages $\text{EuFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. Nous étudierons d'abord la stabilité de phase magnétique, les propriétés structurales et électroniques des composés parents. En se référant de l'énergie totale, l'ordre anti-ferromagnétique se trouve être plus stable que les autres configurations pour EuFe_2As_2 , tandis que le composé EuFe_2P_2 adopte l'alignement ferromagnétique, ce qui est en accord avec l'expérience. La nature de liaison, le magnétisme et la supraconductivité de ces composés et leurs alliages sont analysés via la densité de charge, la densité d'états DOS, la structure de bande ainsi que la surface de Fermi. Les calculs de la structure électronique, réalisés dans le cadre de l'approche LDA+ U montrent que les phases tétragonale et orthorhombique sont caractérisées par leurs électrons 3d-Fe responsables de la supraconductivité, et par les électrons localisés 4f de l'élément de terre rare Eu, d'où vient le magnétisme.

Abstract

We present a density-functional theory study of electronic structure of iron-pnictide EuFe_2M_2 ($M = \text{As}, \text{P}$) compounds and their alloys $\text{EuFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. First, we investigate the magnetic phase stability, structural and electronic properties of the parent compounds. With respect to the total energy, anti-ferromagnetic order is found to be more stable than the other configurations for EuFe_2As_2 , while EuFe_2P_2 adopts the ferromagnetic alignment, which is in agreement with the experiment. The bonding nature, magnetism and superconductivity of these compounds and their related alloys are analyzed via the charge density, the density of states DOS, the band structure as well as the Fermi surface. Electronic-structure calculations, performed within LDA+ U approximation show that the tetragonal and orthorhombic phases are characterized by their 3d-Fe electrons responsible for superconductivity, and by the 4f localized electrons of the rare earth element Eu, of where comes magnetism.

ملخص

نقدم دراسة نظرية وظيفية الكثافة للتركيب الإلكتروني لمركبات بنكتور الحديد EuFe_2M_2 ($M = \text{As}, \text{P}$) وسبائكها $\text{EuFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. علينا أولاً دراسة الاستقرار المغناطيسي، والخصائص البنيوية والإلكترونية للمركبات الأولية. باستخدام الطاقة الإجمالية، التكوين مضاد الانجذاب المغنطيسي وجد أكثر استقراراً من التكوينات الأخرى لـ EuFe_2As_2 في حين المركب EuFe_2P_2 يتبنى تشكيلة عالي الأنفاذية، وهو ما يتفق مع التجربة. ويتم تحليل طبيعة الترابط، المغناطيس والموصلية الفائقة لهذه المركبات وسبائكها عن طريق كثافة الشحنة، الكثافة الإلكترونية وكذلك سطح فيرمي. حسابات البنية الإلكترونية باستخدام التقريب LDA+ U تبين ان رباعي الأضلاع والمعين تتميز بإلكتروناتها 3d-Fe المسؤولة عن الموصلية الفائقة، والإلكترونات 4f لعنصر الأرض النادر، المسؤولة عن المغناطيس.