Nom : Hocine

Prénom : Kamel

Intitulé du sujet :

Etude théorique des propriétés structurales, mécaniques, magnétiques, électroniques et thermodynamiques des composés de type MFe_3N (M= Ru et Os)

Spécialité : Physique

Option : Physique des matériaux

Email : hocine_nano@yahoo.fr

Résumé

L'étude théorique des propriétés structurales, électroniques, magnétiques, mécaniques et thermodynamiques des matériaux à base de nitrures de fer et des métaux de transition du type MFe_3N (M=Ru et Os) a été effectuée à l'aide de la méthode FP-LMTO dans l'approximation du gradient généralisé (GGA). Les calculs ont été effectués sur plusieurs paramètres de réseau afin d'obtenir l'énergie totale et le volume d'équilibres de MFe_3N (M=Ru, Os) dans les deux phases ferromagnétiques (FM) et non-magnétiques (NM). Les calculs ont montré que ces composés sont stables dans la phase FM avec les paramètres de maille 7.25 (3.83Å) et 7,22 (3.82 Å) u.a pour $RuFe_3N$ et $OsFe_3N$, respectivement. À l'état d'équilibre, les calculs LMTO ont montré que les moments magnétiques varient suivant la séquence $RuFe_3N > OsFe_3N$. Les calculs des structures de bande ont montré que les composés MFe_3N (M =Ru et Os) possèdent un caractère métallique. Les constantes élastiques calculées remplissent les conditions de stabilité mécaniques. Les propriétés mécaniques telles que le facteur d'anisotropie (A), le coefficient de Poisson (σ), le module d'Young (E) et le module de cisaillement (G) sont aussi calculées. Nous avons estimé la température de Debye de ces composés à partir de la vitesse moyenne du son. L'effet de la température sur la capacité calorifique et la température de Debye est calculé dans le modèle de Debye quasi-harmonique.

Mots clés :

A. Matériaux magnétiques

B. Propriétés thermodynamiques

C. Constantes élastiques

D. Structure électronique

Abstract

Ab initio study of structural, thermodynamic, elastic, mechanical, magnetic and electronic properties of the cubic perovskite MFe_3N (M = Ru and Os) has been reported using the FP-LMTO method within the gradient generalized approximation for the exchange and correlation potential. The calculations were performed at several lattice parameters to obtain the MFe_3N equilibrium volume. The magnetic phase stability was determined from the total energy calculations for both the nonmagnetic (NM) and ferromagnetic (FM) phases. These theoretical calculations clearly indicate that both at ambient and high pressures, the ferromagnetic phase is more stable than the nonmagnetic phase. In equilibrium volume, the LMTO calculations have shown that the magnetic moments increase in the sequence $RuFe_3N > OsFe_3N$. Our band structure calculations show that MFe_3N (M = Ru and Os) compounds possess metallic character. The thermodynamic properties such as heat capacity and Debye temperatures are calculated with pressure and temperature are successfully obtained. The elastic constants at equilibrium are also determined. We derived the bulk and shear modulus, Young's modulus, and Poisson's ratio. The Debye temperature of MFe_3N was estimated from the average sound velocity.

Keywords:
A. Magnetic materials
C. Thermodynamic properties
D. Elastic constants
E. Electronic structure

ملخص

الدراسة النظرية للخصائص البنيوية , الإلكترونية , المغناطيسية , الميكانيكية و الديناميكا الحرارية لمركبات نتريدات الحديد من النوع $MFe_3N(M=Ru, Os)$ تمت بطريقة FP-LMTO باستخدام التقريب الانحداري المعمم GGA . تم إجراء العمليات الحسابية على عدة معلمات الشبكة من أجل الحصول على الطاقة الإجمالية و الحجم عند التوازن لهذه المركبات على مرحلتين: المغناطيسية (FM)وغير المغناطيسية (NM). و قد أظهرت الحسابات أن هذه المركبات مستقرة في الطور المغناطيسي (FM) بالمعلمات الشبكية التالية:u.a 7.25 (3.83Å) و7.22u.a (3.82Å) لكل من المركبين $RuFe_3N$ و$OsFe_3N$ على الترتيب. في الحالة المستقرة بينت الحسابات أن العزوم المغناطيسية تكون أكبر في المركب $RuFe_3N$. و من خلال إظهار هيكل أو بنية عصابات الطاقة تبين ان لهذه المركبات طابع معدني. قيم ثوابت المرونة المحسوبة بطريقة FP-LMTO بينت انها تحقق شروط التوازن الميكانيكي و مكنتنا من حساب بعض المقادير المميزة للخصائص الميكانيكية مثل معامل التباين المروني(A) , نسبة يواسون(σ) ومعامل يونغ (E) إضافة إلى معامل القص(G). كما قمنا بحساب درجة حرارة ديباي معتمدين على حساب متوسط سرعة الضوء. تطبيق نموذج ديباي شبه التوافقي مكننا من تبيان تأثير درجة الحرارة على السعة الحرارية و درجة حرارة ديباي لهذه المركبات.

الكلمات المفتاحية :

أ- المواد المغناطيسية.

ب- الخصائص الديناميكا الحرارية.

ج- الثوابت المرونية.

د البنية الإلكترونية.