NOM : Bensaid
Prénom : Djillali
Tel:0793158433
E_mail : djizer@yahoo.fr

Spicialité: physique
Option : physique des matériaux magnétiques
Intitulé

« Étude des propriétés Structurales , électroniques , magnétiques et optiques des matériaux $BiMnO_3$, $BiCrO_3$, $Bi_{1-x}Sr_xMnO_3$ et $Bi_{1-x}Sr_xCrO_3$ »

Directeur de thèse : Benkhettou Nour eddine
Date de soutenance : 02/02/2012
Heur :14h

Abstract

The candidate multiferroic BiCrO3 and its chemical neighbors BiMnO3 and BiFeO3 are known to be ferromagnetic and ferroelectric respectively. With structural distortions driven by the strongly polarizable Bi ions, we present results of the first-principles density functional calculations using the (FP-LMTO) method with the spin-orbit coupling for those materials in the pseudo-cubic perovskite phase. The results showed that the valence bands in these compounds are formed by the 6p orbitals of bismuth and 3d orbital's of the transition metals. Our results indicate that these materials have metallic behavior for spin-up polarization but being a clear tandance for semiconductor spin-down BiMnO3 We performed first-principles DFT calculations of the atomic and electronic structure of pure $BiMnO_3$ and $SrMnO_3$ and their solid solution with Sr doping of 50%. We discuss the band structure, density of states (DOS), and the electronic density distribution. These calculations serve as a first step for the study of thermodynamics of $Bi_xSr_{(1-x)}MnO_3$ solid solutions and, in particular, for an analysis of the Sr impurity spatial distribution in the host $BiMnO_3$ matrix, which is important for the giant Magneto-optic effects and fuel cell applications of this solid solution.

Résumé

Le candidat multiferroïques BiCrO3 et ses voisins chimiques BiMnO3 et BiFeO3 sont connus pour être ferromagnétiques et ferroélectriques, respectivement. Avec des distorsions structurelles tirée par les ions fortement polarisables Bi, nous présentons les résultats des calculs de densité de la première principes fonctionnels en utilisant la méthode (FP-LMTO) avec le couplage spin-orbite pour ces matières dans la phase perovskite pseudo-cubique. Les résultats ont montré que les bandes de valence de ces composés sont formés par les orbitales 6p de bismuth et 3d orbitale de métaux de transition. Nos résultats indiquent que ces matériaux ont un comportement métallique pour la polarisation de spin up, mais étant une tandance clair pour semi-conducteurs de spin-down BiMnO3 Nous avons effectué de premiers principes calculs DFT de la structure atomique et électronique des BiMnO3 pure et SrMnO3 et leur solution solide avec Sr dopage de 50%. Nous discutons de la structure de bandes, densité d'états (DOS), et la distribution de densité électronique. Ces calculs servent comme une première étape pour l'étude de la thermodynamique des BixSr (1-x) MnO3

solutions solides et, en particulier, pour une analyse de la répartition spatiale dans l'impureté Sr l'hôte BiMnO3 matrice, ce qui est important pour la magnétorésistance géante effets optiques et les applications de pile à combustible de cette solution solide

ملخص

من المعروف أن المرشح multiferroic BiCrO3 و أشبهه من الناحية الكيميائية BiMnO3 و BiFeO3 معروفين على انهم لهم خاصية ferromagnétiques وو العازلية الكهربائية ferroélectriques المغناطيسية مع وجود التشوهات الهيكلية يقودها الأيونات لها خاصية القطبيةBi

اقتران تدور في المدارFP – LMTO ونحن تقديم نتائج حسابات كثافة المبادئ الأولى الوظيفية باستخدام طريقة لمواد في المرحلة شبه مكعب . وأظهرت النتائج التي تتشكل العصابات التكافؤ من هذه المركبات ، من قبل والمدارات P6 البيسموت المدارية D3 المعادن تمر بمرحلة انتقالية .

نتائجنا تشير الى ان هذه المواد لها سلوك معدنية لاستقطاب تدور، ولكن كونها واضحة tandance أشباه الموصلات تدور إلى أسفل BiMnO3 أجرينا أول مبادئ حسابات DFT في التركيب الذري والإلكترونية من الذهب الخالص و BiMnO3 SrMnO3 وحلولها متينة مع الأب المنشطات من 50 ٪. نناقش الفرقة هيكل، وكثافة من الدول (DOS) وتوزيع كثافة الإلكترونات. هذه الحسابات تكون بمثابة خطوة أولى لدراسة الديناميكا الحرارية من BixSr (1 – X) MnO3 حلول صلبة، وعلى وجه الخصوص ، لتحليل التوزيع المكاني للشوائب في مصفوفة الأب المضيف BiMnO3، وهو المهم بالنسبة للتأثيرات الضوئية المغناطيسية العملاقة وتطبيقات خلايا الوقود الصلبة لهذا الحل