

THESE DE DOCTORAT

Présenté par : DINE EL HANNANI MOHAMED

Spécialité : Physique.

Option : Physique des matériaux magnétiques.

Intitulé : Etude des propriétés structurales élastiques, électroniques et magnétiques des pérovskites LaBO_3 ($\text{B}=\text{Mn, Co, Ga}$) et $\text{SrB}'\text{O}_3$ ($\text{B}'=\text{Sn, Nb, Ti}$)

Email: djahcom@yahoo.fr

Tel : 0777322823

ABSTRACT

Using first principle density functional calculations, the structural, electronic and magnetic properties of cubic perovskites LaBO_3 ($\text{B}=\text{Mn, Co, Ga}$) and $\text{SrB}'\text{O}_3$ ($\text{B}'=\text{Ti, Sn, Nb}$) were studied by means of the full-potential linear muffin-tin orbital method. Calculations were performed within the local spin density approximation (LSDA) to the exchange correlation potential. The magnetic phase stability was determined from the total energy calculations for both ferromagnetic (FM) and non-magnetic (NM) phases. Our calculations show that the magnetic phase is more stable than the non-magnetic phase from LaMnO_3 perovskite. To our knowledge the elastic constants of this compound have not yet been measured or calculated, hence our results serve as a first quantitative theoretical prediction for future study. Additionally, the band structures, the density of state and the magnetic moments were analyzed.

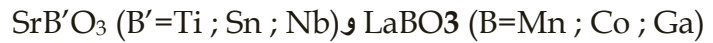
RESUME

Nous avons exécuté des calculs du premier principe FP-LMTO de propriétés structurales électroniques et magnétiques de LaBO_3 ($\text{B}=\text{Mn; Co; Ga}$) et $\text{SrB}'\text{O}_3$ ($\text{B}'=\text{Ti; Sn; Nb}$) dans la phase cubique de pérovskite. Nous avons Calculé la pression à la quelle le LaMnO_3 subit une transition de phase non magnétique à la

phase magnétique alors que les autres matériaux subissent une transition de phase minimale. Nous ne nous rendons pas compte d'aucune donnée expérimentale ou théorique pour les propriétés élastiques de ces composés et ainsi nos calculs peuvent être employés pour couvrir ce manque de données pour ces composés. Nous avons montré les structures de band, les densités d'états et les moments magnétiques des matériaux.

المخلص

لدراسة الخصائص التكوينية والإلكترونية والمغناطيسية والروابط الكيميائية للبيروفسكيت المكعب لكل من



باستخدام الطريقة التقريبية FP-LMTO استعمالنا طريقة LDA و LSDA.

لم نجد أي بحث درست فيه مرونة هذه المواد لمقارنتها بنتائج حساباتنا. كما أننا قد درسنا من خلال هذا البحث الخاصية الإلكترونية و الروابط الكيميائية ، إلى جانب خاصة العصبية والكثافة العامة والجزئية عرضنا العزم المغناطيسي لكل من العناصر المكونة لهذه المواد.