Nom : BENIDRIS

Prénom : AHMED

Spécialité : Physique

Option : Nanosciences des Matériaux, Nanotechnologies, et Nano-Métrologie

Intitulé :

Étude ab-initio de la supraconductivité dans les systèmes RSn_3 (R=Elément de Terre Rare).

Email : benidris_ahmed@yahoo.fr

Résumé

Ce travail est basé sur l'utilisation de la méthode des ondes planes augmentées à potentiel total (FP-LAPW). Cependant, il existe plusieurs approximations concernant la détermination du potentiel d'échange et de corrélation, nous avons utilisé le potentiel d'échange et de corrélation (GGA, GGA+*U*). Une première partie est consacrée pour la stabilité structurale et magnétique de tous les composés à base des terres rares (RSn_3). Dans ce travail nous avons étudié aussi la structure de bande électronique et la densité d'état de ces matériaux avec les deux différentes approches dans leurs configurations magnétiques déterminées. Les résultats prouvent que le potentiel de coulomb influe sur les orbitales *4f* des terres rares. Nous avons pu expliquer également le comportement de liaison chimique des composés RSn_3 à travers l'analyse de la densité de charge. Une indication robuste sur la supraconductivité a été déduite à travers l'étude de la surface de Fermi de cette série de composés.

Abstract

In this work, we have used the FP-L /APW+*lo* method to study the electronic structure of RSn_3compounds using different approaches: GGA, GGA+*U*. The first part is conserved to the study of the magnetic phase stability of these materials. After this, we have calculated the band structure and densities of states by varying the Hubbard potential. The results prove that the Coulomb potential affects the 4*f* orbitals of rare earth elements and it is a factor key to predict the correct state of this series of compounds. We have also explained the behavior of chemical bonding of these compounds via the charge density. A robust indication has been deduced through the study of the Fermi surfaces of this series of compounds.