

Nom & Prénom : **BOUASRIA Ahmed**

Intitulé : **Étude de premier principe de la structure électronique des dioxydes d'actinides**

Spécialité : **Physique**

Option : **Nanosciences des Matériaux, Nanotechnologies, et Nano-Métrie**

E-mail : [bouasria.sda@hotmail.fr](mailto:bouasria.sda@hotmail.fr)

### Abstract

We present a systematic comparison of the magnetic phase stability, mechanical properties, electronic density of states, and band gaps of actinide dioxides,  $AnO_2$  ( $An=$ Actinide elements) predicted by the GGA+ $U$  formalism ( $U=0, 2, 4, 6, 8, 10$ ). The behavior of  $5f$  electrons have been investigated as a function of the Coulomb repulsion  $U$ . The computed lattice constants and band gaps of  $AnO_2$  are in consistently good agreement with the available experimental data across the series. From GGA+ $U$  ( $U = 4$  eV) calculations, all actinide dioxides are found insulators. Our results show that the Coulomb potential is a key factor to understand the electronic and magnetic properties of this series of materials.

### Résumé

Nous présentons une comparaison systématique de la stabilité de phase magnétique, les propriétés mécaniques, la densité d'états électroniques et les gaps d'énergies des dioxydes actinides,  $AnO_2$  ( $An =$  actinides éléments) prédite par le formalisme GGA+ $U$  ( $U = 0, 2, 4, 6, 8, 10$ ). Le comportement des électrons  $5f$  ont été étudiées en fonction de la répulsion de Coulomb  $U$ . Les constantes de réseau et les gaps d'énergies de la série  $AnO_2$  sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles. A partir des calculs GGA+ $U$  ( $U = 4$  eV), tous les dioxydes d'actinides sont trouvés des isolants. Nos résultats montrent que le potentiel de Coulomb est un facteur clé pour comprendre les propriétés électroniques et magnétiques de cette série de composés.

### ملخص

في هذا العمل، نقدم مقارنة منهجية لاستقرار المغناطيسي، الخواص الميكانيكية، الكثافة الإلكترونية و الفجوات الطاقوية لمؤكسدات الأكتينيدات  $AnO_2$  التي تنبأ بها النهج GGA+ $U$  وقد تم دراسة سلوك الإلكترونات  $5f$  بواسطة تنافر كولومب  $U$ . الثوابت الهيكلية، الفجوات الطاقوية لهذه السلسلة هي في توافق جيد مع البيانات التجريبية المتوفرة. إنطلاقاً من الحسابات النظرية، تم العثور على أن جميع هذه الأكتينيدات هي عوازل. نتائجنا تظهر أن تنافر كولومب يمثل عامل أساسي لفهم الخصائص الإلكترونية والمغناطيسية لهذه السلسلة من المواد