



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr : AZOUAOUI Abdelouahid

Soutiendra : le 28/11/2020 à 13 H

Lieu : Centre Visio conférence

Une thèse intitulée :

Contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés à bases de métaux de transition

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Sciences des Matériaux et procédés industriels : (SMPI)

Spécialité : Sciences des Matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr.REZOUK Abdallah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr. BENZAKOUR Najib	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Co-Directeur de thèse	Pr. HOURMATALLAH Ahmed	PES	Ecole Normale Supérieure - Fès
Rapporteurs	Pr. KEROUAD Mohamed	PES	Faculté des Sciences - Meknès
	Pr. BOUSLYKHANE Khalid	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. CHAHBOUN Adil	PES	Faculté des Sciences et Techniques - Tanger
Membre	Pr. HAMEDOUN Mohamed	PES	MAScIR- Rabat

Résumé :

Dans ce manuscrit nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des composés à bases des métaux de transition en se basant sur trois approches : la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentées dans le code quantum espresso (QE), le développement en séries à haute température et la simulation de Monte Carlo.

La première partie concerne à l'étude des ferrites spinelles de formule $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$, en utilisant le formalisme de DFT et la méthode de développement en séries à haute température combinée avec les approximants de Padé. Les résultats obtenus montrent que le paramètre du réseau cristallin et le moment magnétique calculés dans le cadre de DFT augmente avec l'augmentation de la concentration de l'ion non magnétique A. L'étude de la densité d'états de la structure de bande montre que le système $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$ a un caractère semi-métallique pour la concentration $x = 0.5$ dans le cas B=Co et un caractère semi-conducteur pour les autres cas considérés. Le calcul par la méthode de HTSE et de la théorie du champ moyen montre que la température de Curie diminue avec l'augmentation de la concentration, x de l'ion non magnétique A.

La deuxième partie concerne à l'étude des antiperovskites de formule TM_4N . Les propriétés élastiques et thermodynamiques des antiperovskites TM_4N étudiées ont été calculées dans le cadre de package thermo-pw. Les résultats obtenus montrent que la chaleur spécifique C_v de TM_4N suit la limite de Dulong-Petit à haute température et un comportement de la loi de puissance de Debye à basse température et montrent aussi que les antiperovskites de type TM_4N sont des matériaux durs. Les températures critiques obtenues par la simulation de Monte Carlo montrent un bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux et ces valeurs de T_C sont trouvées à l'ordre de la température ambiante pour Cr et largement supérieure pour Co et Mn.

La troisième partie concerne à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques de CrX . Les résultats montrent que CrX a un comportement semi-métallique dans l'arrangement FM. CrN subit des transitions de phases structurales et magnétiques d'une structure cubique NaCl antiferromagnétique à orthorhombique non magnétique (phase Pnma) à 201 GPa et CrAs subit aussi des transitions de phases structurales et magnétiques d'une structure cubique ZB ferromagnétique à Pnma antiferromagnétique à 5 GPa. D'après les simulations de Monte Carlo, les températures critiques obtenues sont $T_C = 310K$ et $T_C = 790K$ pour CrN et CrAs, respectivement.

Mots clés: Ferrites spinelles; Antiperovskites; Métaux de transition; DFT; Monte Carlo; HTSE; Température Critique

Contribution to the study of structural, electronic and magnetic compounds based on transition metals

Abstract:

In this manuscript we have studied the structural, electronic and magnetic properties of compounds based on transition metals. Based on three approaches: Density Functional Theory (DFT) implemented in the quantum espresso (QE) code, high temperature serial development and Monte Carlo simulation. The first part concerns the study of spinel ferrites of formula $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$, using the formalism of DFT and the method of development in series at high temperature combined with the approximants of Padé. The results obtained show that the crystal lattice parameter and the magnetic moment calculated in the framework of DFT increases with the increase in the concentration of the non-magnetic ion A. The study of the density of states of the band structure shows that the system $A_xB_{1-x}Fe_2O_4$ has a semi-metallic character for the concentration $x = 0.5$ in the case $B = Co$ and a semiconductor character for the other cases considered. Calculation by the method of HTSE and the mean field theory shows that the Curie temperature decreases with increasing concentration, x of the non-magnetic ion A. The second part concerns the study of antiperovskites of the formula TM_4N . The elastic and thermodynamic properties of the studied antiperovskites TM_4N were calculated within the framework of the thermo package-pw. The results obtained show that the specific heat C_v of TM_4N follows the Dulong-Petit limit at high temperature and a behavior of the Debye power law at low temperature and also show that the antiperovskites of type TM_4N are hard materials. The critical temperatures obtained by the Monte Carlo simulation show a good agreement with the theoretical and experimental results and the values of T_C are found in the order of the ambient temperature for Cr and much higher for Co and Mn. The third part concerns the study of the structural, electronic and magnetic properties of CrX . The results show that CrX has semi-metallic behavior in the FM arrangement. CrN undergoes structural and magnetic phase transitions from an antiferromagnetic to nonmagnetic orthorhombic NaCl cubic structure (Pnma phase) at 201 GPa and CrAs also undergoes structural and magnetic phase transitions from a ferromagnetic ZB cubic structure to antiferromagnetic Pnma at 5 GPa. According to Monte Carlo simulations, the critical temperatures obtained are $T_C = 310K$ and $T_C = 790K$ for CrN and CrAs, respectively.

Keywords: Spinel ferrites; Antiperovskites; Transition metals; DFT; Monte Carlo; HTSE; Critical temperature.