



## 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
<b>Président</b>	Pr.REZOUK Abdallah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Directeur de thèse</b>	Pr. BENZAKOUR Najib	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Co-Directeur de thèse</b>	Pr. HOURMATALLAH Ahmed	PES	Ecole Normale Supérieure - Fès
<b>Rapporteurs</b>	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
<b>Membre</b>	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.