

**Université Djillali Liabes**  
**Faculté Des Sciences Excates**  
**Sidi Bel Abbes**

Thèse de Doctorat en Physique des Matériaux intitulée:  
*Contribution à l'étude des propriétés mécaniques, optoélectroniques et thermophysiques des matériaux de type  $X^{II}Y^{III}_2Z_4$  et  $X^{IV}Y^{II}_2Z_4$  ( $Z=O, S$  et  $Se$ ) par la méthode FP-LPAW.*

Par : SEMARI Fatiha

Adresse : Cité des 28 Logts, Bloc B6- Tizi-Masacra

Mail: [khenatasafaa@yahoo.fr](mailto:khenatasafaa@yahoo.fr)

## Abstract

The theoretical studies play a fundamental role in developing of new materials and new devices for diverse industrial applications. With advanced ab initio method, it is now feasible to access a database of crystal structure and use computer software to obtain interesting properties in the case in which experimental measurements are absent. In this reason we have attempt to determine the structural, electronic, elastic and optical properties for the cubic spinel  $MgIn_2S_4$  and  $CdIn_2S_4$  compounds using the full-potential linearized-augmented plane wave method within the density functional theory DFT, which is implemented in the Wien 2K code. The exchange and correlation potential was treated by the generalized-gradient approximation (GGA). Moreover, the Engel-Vosko GGA formalism is also applied to optimize the corresponding potential for band structure calculations. The ground state properties, including

the lattice constants, the internal parameter, the bulk modulus and the pressure derivative of the bulk modulus are in reasonable agreement with the available data. Using the total energy-strain technique, we have determined the full set of first-order elastic constants  $C_{ij}$  and their pressure dependence, which have not been calculated or measured yet. The shear modulus, Young's modulus and Poisson's ratio are calculated for ideal polycrystalline  $XIn_2S_4$  aggregates. The Debye temperature is estimated from the average sound velocity. Electronic band structures show a direct band gap ( $\Gamma$ - $\Gamma$ ) for  $MgIn_2S_4$  and an indirect band gap ( $K$ - $\Gamma$ ) for  $CdIn_2S_4$ . The calculated band gaps with EVGGA show a significant improvement over the GGA. The optical constants, including the dielectric function  $\epsilon(\omega)$ , the refractive index  $n(\omega)$ , the reflectivity  $R(\omega)$  and the energy loss function  $L(\omega)$  were calculated for radiation up to 30 eV.

## Résumé

Les études théoriques ont joué un rôle fondamental dans le développement des nouveaux matériaux et des nouveaux dispositifs pour diverses applications industrielles. Avec le développement des méthodes ab initio, il est maintenant possible d'accéder à une base de données d'une structure cristalline et utiliser un logiciel pour obtenir des propriétés intéressantes dans le cas où des mesures expérimentales sont absentes. A cet effet, nous avons tenté de déterminer les propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des deux matériaux de structure cubic spinelle, cas du  $MgIn_2S_4$  et  $CdIn_2S_4$  en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentée, implémentée dans le code de calcul Wien2k. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA). De plus le formalisme du gradient généralisé corrigé par Engel-Vosko (EV-GGA) est aussi appliqué pour les propriétés électroniques et optiques. Les résultats trouvés pour les

propriétés structurales, tels que, le paramètre de réseaux, le module de compressibilité, le paramètre interne  $u$  sont en bon accord avec ceux disponibles dans la littérature. Les constantes élastiques  $C_{ij}$  sont déterminées en utilisant la technique de la variation de l'énergie totale par rapport à la déformation. D'autres constantes élastiques telles que le module de cisaillement, le module de Young, le coefficient de Poisson, les vitesses du son et la température de Debye sont aussi dérivées à partir de ces constantes élastiques obtenues. Les calculs des structure de bandes montrent que le  $\text{MgIn}_2\text{S}_4$  possède un gap direct ( $\Gamma$ -  $\Gamma$ ) tandis que le  $\text{MgIn}_2\text{S}_4$  possède un gap indirect ( $\text{K}$ - $\Gamma$ ). Les gaps d'énergies calculés par l'approximation EVGGA sont légèrement plus grand en comparaison à ceux calculés par la GGA. La dernière étape de nos calculs a été consacrée à l'étude des propriétés optiques de ces spinelles. Cependant, à partir de la détermination de la fonction diélectrique  $\epsilon(\omega)$ , nous avons déduit les grandeurs optiques (tels que le spectre de la réflectivité  $R(\omega)$ , la fonction de perte énergies  $L(\omega)$ ) pour des fréquences d'énergies allant jusqu'au 30 eV.

## ملخص

لعبت الدراسات النظرية دورا أساسيا في تطوير مواد جديدة و أجهزة جديدة للتطبيقات الصناعية المختلفة مع تقدم الطرق *ab-initio* حيث أصبح من الممكن الآن الوصول إلى قاعدة البنية البلورية و استخدام برامج الكمبيوتر للحصول على خصائص مثيرة للاهتمام التي تكون فيها القياسات التجريبية غائبة. استنادا على هذا حاولنا تحديد الخصائص البنيوية, المرونية, الالكترونية و الضوئية للمركبي  $\text{CdIn}_2\text{S}$  و  $\text{MgIn}_2\text{S}$  باستخدام طريقة الموجات المتزايدة الخطية المدرجة مباشرة في البرنامج Wien2k و بالاعتماد على كموني التبادل GGA, EVGGA حيث استخدم تقريب GGA في إيجاد الخواص البنيوية و تقريب EVGGA في حساب الخواص الضوئية و الالكترونية.

النتائج المحصل عليها بالنسبة للخواص البنيوية جد متوافقة مع البيانات التجريبية و من خلال حساب الخصائص الالكترونية وجدنا ان  $MgIn_2S_4$  يملك عصابة طاقة ممنوعة مباشرة أما  $CdIn_2S_4$  فيملك عصابة طاقة ممنوعة غير مباشرة.

و قد قمنا أيضا بحساب ثوابث المرونة  $C_{ij}$  باستخدام تغيير الطاقة بدلالة التوتر بعدها استنتجنا معامل القص معامل يونغ و نسبة بواسون ,سرعات الصوت و درجة حرارة ديباي من الثواب التي تم الحصول عليها .

أما المرحلة الأخيرة فخصصت لحساب الخصائص الضوئية لهذه المواد من خلال حساب دالة العزل ,التي سمحت لنا بالحصول على مقادير ضوئية مثل الانعكاسية , وفقدان الطاقة من اجل تواترات اقل من 30eV