

Nom : Bougherara

Prenom : Kada

Intitulé : Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des systèmes sulvanites: Cu_3MSe_4 (M=V, Nb, Ta) : Etude ab-initio

Email : k.bougherara@yahoo.com

Résumé

Cette thèse a pour but d'étudier l'ensemble des propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des alliages ternaires type sulvanite Cu_3TMSe_4 (TM = V, Nb et Ta). Les calculs ab initio ont été effectués en utilisant la méthode linéaire des ondes planes augmentées plus des orbitales locales (FP LAPW+lo) cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), la DFT. Afin de calculer l'énergie totale, le potentiel d'échange et de corrélation (XC) a été traité par l'approximation de gradient généralisée de Wu et Cohn (WC-GGA). Nous avons aussi calculé les constantes élastiques telles que le module de Young, le facteur de poisson, le coefficient d'anisotropie. Nos résultats montrent bien que ces matériaux sont fragiles. Le calcul des structures de bandes électroniques a été effectué en utilisant l'approximation du gradient généralisé (EV-GGA) corrigée par Engel et Vosko et la mBJ développé, nos valeurs des gaps calculés par l'approximation TB-mBJ sont légèrement plus grandes si on les compare par ceux calculés par EV-GGA.

La deuxième étape de nos calculs a été consacrée à l'étude des propriétés optiques de ces sulvanites. 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 d'énergies $L(\omega)$) pour des fréquences d'énergies allant jusqu'à 40 eV. La Comparaisons des résultats des calculs des propriétés structurales, et électroniques et optiques aux données expérimentales a permis de démontrer la capacité de cette approche.

Mots Clés : Composés sulvanite, calculs ab-initio, TB-mBJ, constants élastiques, propriétés électroniques, propriétés optiques.

Abstract

The structural and optoelectronic properties of the cubic Cu_3TMSe_4 (TM = V, Nb and Ta) sulvanite compounds have been calculated using a full-potential augmented plane wave plus local orbitals (FP-APW+lo) method within the density functional theory. The exchange-correlation potential was treated with the generalized gradient approximation of Wu and Cohen (WC-GGA) to calculate the total energy. Moreover, the Engel-Vosko generalized gradient approximation (EV-GGA) and the modified Becke-Johnson potential (TB-mBJ) were also applied for the electronic and optical properties. The ground state properties, including, lattice constants, bulk modulus are in reasonable agreement with the available experimental and theoretical data. The elastic constants C_{ij} are computed using the total energy variation versus strain technique. The polycrystalline elastic moduli, namely; shear modulus, Young's modulus, Poisson's ratio and anisotropic factor were derived from the obtained single-crystal elastic constants. As a result, brittleness behaviour of these compounds is interpreted via the calculated elastic constants C_{ij} . The calculations of the electronic band structure show that these compounds have an indirect energy band gap (R-X) and the TB-mBJ approximation yields larger fundamental band gaps compared to those of WC-GGA and EV-GGA. The dielectric function, refractive index, extinction coefficient, reflectivity, and energy loss function were calculated for radiation up to 45 eV.

Keywords: Sulvanite compounds; ab-initio calculations; TB-mBJ, elastic constants; electronic properties; optical properties.

ملخص

تهدف هذه الأطروحة إلى دراسة الخصائص البنيوية، المرورية، الإلكترونية والبصرية لسلسلة المواد Cu_3TMSe_4 ($TM = V, Nb$ and Ta) باستخدام طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا بكل الالكترونات (FP-LAPW) والتي تركز على نظرية كثافة الدالية (DFT) عولجت باستعمال علاقة تقريب الانحدار المعمم (GGA) لحساب الطاقة الكلية. علاوة على ذلك، معمم تقريب التدرج ل (Engel-Vosko (EV-GGA) و الجهد المعدل ل (Becke-Johnson (TB-mBJ). استعملت لحساب الخصائص الإلكترونية والبصرية. حسبنا أيضا الثوابت المرورية كمعامل يونج.... الخ. نتائجا تظهر أن المواد هشة. الخطوة الثانية من حساباتنا خصصت لدراسة الخصائص البصرية، بدأ بتحديد الدالة العازلة $\epsilon(\omega)$. استنتجنا المقادير البصرية (مثل أن الطيف من الانعكاسية $R(\omega)$ ، ودالة فقدان الطاقة $L(\omega)$ لترددات الطاقة حتى 40 إلكترون فولت.

الكلمات المفتاحية:

مركبات *sulvanite* ، حساب TB-mBJ ، *ab-initio* ، الثوابت المرورية ، الخصائص الإلكترونية ، الخصائص البصرية