

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



**UNIVERSITE DJILLALI LIABES**  
**FACULTE DES SCIENCES EXACTES**  
**SIDI BEL ABBES**

Melle : Ould kada Mokhtaria

Né(e) le...27/09/1979..... à...Tircine-Saida.....

Adresse : rue djallouli mohamed - Ouled Brahim willaya Saida.20221.

Téléphone : 0778750489.....

Fax :...../.....

E-mail : olmokhtaria@yahoo.fr.

Spécialité :..... PHYSIQUE .....

Option :..... PHYSIQUE DES MATÉRIAUX

Grade: **DOCTORAT** .....

Intitulé de la thèse: **Contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques et thermodynamiques des matériaux à base de Rhodium Rh et Cérium Ce par la méthode FP-LAPW.**

# Abstract

The theoretical studies have been fundamental in the development 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 and thermodynamic properties for materials based on Rhodium "Rh" and for materials based on Cerium "Ce" using the full potential augmented plane waves method within the density functional theory DFT, which is implemented in the Wien 2K code.

Firstly, we present theoretical study of structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of Rh<sub>3</sub>X (X = Zr, Nb, Ta) intermetallic compounds are investigated in the frame work of density functional theory (DFT).The exchange-correlation (XC) potential is treated with the generalized gradient approximation (GGA) and local density approximation (LDA). The calculated structural parameters are in excellent agreement with the experimental data.The elastic constants is obtained by calculating the total energy versus volume conserving strains using Mehl model. The electronic and bonding properties are discussed from the calculations of band structures (BSs), densities of states and electron charge densities. The volume and bulk modulus at high pressure and temperature are investigated. Additionally,thermodynamic properties such as the heat capacity, thermal expansion and Debye temperature at high pressures and temperatures are also analyzed.

This thesis presents also a theoretical study of structural, electronic, magnetic and thermodynamic properties for CeX<sub>3</sub> (X = In, Sn) intermetallic compounds are investigated in the frame work of (DFT).The exchange-correlation (XC) potential .The calculated structural properties are in good agreement with available experimental and theoretical data. The elastic constants is obtained by calculating the total energy versus volume conserving strains using Mehl model. The magnetic study reveals that CeX<sub>3</sub> is a antiferromagnetic material. Furthermore, we present a comparative study between the band structures, electronic structures, total and partial densities of states and total magnetic moment calculated within both GGA and LDA schemes. Our band structure calculations show the metallic behavior of this compound.The thermodynamic properties are predicted through the quasi-harmonic Debye model, in which the lattice vibrations are taken into account. The variation of relative change in volume, heat capacities and the Debye temperature with temperature and pressure are successfully achieved.

**Keywords:** ab initio method, intermetallics, electronic structure, mechanical properties, thermodynamic properties, Rh<sub>3</sub>X, CeX<sub>3</sub>.

# 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, électroniques et thermodynamiques des composés à base de Rhodium "Rh" et de Cerium "Ce", en utilisant la méthode des ondes plane augmentée au sein de la théorie fonctionnelle de la densité DFT, qui est implémentée directement dans le code Wien2K.

Tout d'abord, nous avons présenté l'étude théorique des propriétés structurales, électroniques, élastiques et thermodynamiques des composés intermétalliques  $Rh_3X$  ( $X = Zr, Nb, Ta$ ) qui sont étudiés dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT). Le potentiel d'échange-corrélation (XC) est traité avec l'approximation du gradient généralisé (GGA) et l'approximation de densité locale (LDA). Les paramètres structurels calculés sont en excellent accord avec les données expérimentales et théoriques. Nous avons calculé les constantes élastiques  $C_{ij}$  de ces matériaux, le module de Young (E), le coefficient de poisson ( $\nu$ ), le facteur d'anisotropie (A) et le rapport B/G. ainsi, nous avons calculé les propriétés électroniques montre que les matériaux sont du comportement métallique. La dernière étape de nos calculs a été consacrée à l'étude les propriétés thermodynamiques telles que la capacité de chaleur, dilatation thermique et la température de Debye à des pressions et températures élevées sont également analysés.

Cette thèse présente également une étude théorique des propriétés structurales, électroniques, élastiques, magnétiques et thermodynamiques pour  $CeX_3$  ( $X = In, Sn$ ) composés intermétalliques qui sont étudiés dans le cadre de (DFT). Le potentiel d'échange-corrélation (XC) a laide de l'approximation LDA et GGA. Les propriétés structurales calculées sont en bon accord avec les données expérimentales et théoriques. L'étude révèle que  $CeX_3$  magnétique est un matériau antiferromagnétique. Nous avons calculé les constantes élastiques  $C_{ij}$  de ces matériaux, le module de Young (E), le coefficient de poisson ( $\nu$ ), le facteur d'anisotropie (A) et le rapport B/G. En de plus, Nous avons également étudié les propriétés électroniques des composés en déterminant les structures de bandes et les densités d'états électroniques. Les résultats montrent que les composés ont un caractère métallique. La dernière étape de nos calculs a été consacrée à l'étude des propriétés thermodynamiques telles que la capacité de chaleur, dilatation thermique et la température de Debye à des pressions et températures élevées.

**Mots clés :** méthode ab initio, intermétalliques, Structure électronique, propriétés mécaniques, propriétés thermodynamiques,  $Rh_3X$ ,  $CeX_3$ .

لعبت الدراسات النظرية دورا أساسيا في تطوير مواد جديدة وأجهزة جديدة للتطبيقات الصناعية المختلفة. مع تقدم الطرق *ab initio* صار من الممكن الآن الوصول إلى قاعدة بيانات البنية البلورية واستخدام البرمجيات للحصول على خصائص مثيرة للاهتمام التي تكون فيها القياسات التجريبية غائبة. استنادا على هذا حاولنا تحديد الخصائص البنيوية والإلكترونية والحرارية لمواد جديدة تستند إلى الروديوم (**Rh**)، والسير يوم (**Ce**) باستخدام أسلوب الموجات المتزايدة في إطار نظرية الكثافة الوظيفية **DFT**، المدرجة مباشرة في البرنامج **Wien2K**

أولاً، قدمنا الدراسة النظرية للخصائص البنيوية، الإلكترونية والديناميكية الحرارية لمركبات السبائك **Rh3X**. الخصائص البنيوية المحسوبة في اتفاق جيد مع البيانات التجريبية والنظرية المتاحة. ثوابت المرونة المحسوبة يتم الحصول عليها بواسطة حساب الطاقة الكلية، من خلال حساب الخصائص الإلكترونية وجدنا أن **Rh3X** له سلوك معدني. من خلال نموذج ديباي شبه التوافقي قمنا بحساب الخصائص الحرارية تحت تأثير كل من الضغط و درجة الحرارة.

تقدم هذه الأطروحة أيضا دراسة النظرية من الخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية والحرارية لمركبات السبائك **CeX3** و درس الخصائص البنيوية المحسوبة في اتفاق جيد مع البيانات التجريبية والنظرية. تم حساب الثوابت المرونة. وتكشف الدراسة المغناطيسية أن **CeX3** هو مادة مضاد الانجذاب المغناطيسي. بالإضافة إلى ذلك، فإننا نقدم دراسة الخصائص الإلكترونية وجدنا أن **CeX3** له سلوك معدني. من خلال نموذج ديباي شبه التوافقي قمنا بحساب الخصائص الحرارية تحت تأثير كل من الضغط و درجة الحرارة.

**الكلمات المفتاحية:** الطرق *ab initio*، مركبات السبائك، الدراسة الإلكترونية، الخصائص الميكانيكية، الخصائص الحرارية، **Rh3X**، **CeX3**