

# Résumé

---

---

**Nom :** MEHTOUGUI

**Prénom :** NABILA

**Diplôme :** Doctorat en science

**Spécialité :** Physique

**Option :** Science des Matériaux

**email :** meht\_nabila@yahoo.fr

**Intitulé :** *ETUDE THEORIQUES DES STRUCTURES*

*ELECTRONIQUES DES DIOXYDES*

## Résumé :

Nous avons fait l'étude théorique de la stabilité structurales , les propriétés mécaniques et électroniques de trois dioxydes  $\text{RuO}_2$ ,  $\text{CeO}_2$  et  $\text{ZrO}_2$ , en utilisant la méthode du potentiel total des orbitale linearisées (FP-LMTO) à la base de la (DFT) avec l'approche (LDA) pour le potentiel d'échange et de corrélation.les propriétés à l'état d'équilibre comme les paramètres de maille, le module e compressibilités et sa dérivées pour les quatre différentes phases considérés (la Fluorite ,rutile pyrite et marcasite),ont été calculées.

Les constantes élastiques des oxydes le  $\text{RuO}_2$ ,  $\text{CeO}_2$  et  $\text{ZrO}_2$  dans les différentes phases stables, ont étaient déterminées en utilisons la technique de variation de l'énergie total en fonction des contraintes.les modules élastiques des oxydes,le module cisaillement(G),le module de Young(E) et le rapport de poisson ( $\nu$ ) ont étaient calculées.la température de Debye ( $\theta_D$ ) et la vitesse du son moyenne ( $V_m$ ),ont étaient calculées à partir des valeurs des modules élastiques obtenus.

Dans l'objectif de déterminer transition structurale des phases possibles de nos matériaux.

Nos résultats pour la structure de bande et la densité d'état(DOS), indiquent que le  $\text{RuO}_2$  est un semi-conducteur dans la structure fluorite or que la structure rutile présente un caractère métallique .pour les oxydes de cérium et zirconium sont des semi-conducteurs dans les structure fluorite, pyrite respectivement.

Notre ambition que ce calcul inspirera de nouvelles recherches expérimentales pour ce type de matériaux

## Abstract :

We theoretically study the structural stabilities, elastic and electronic properties of dioxide materials by using the full-potential linear muffin-tin FP-LMTO method, in the framework of the density functional theory (DFT) within the local density approximation (LDA) for the exchange correlation functional. The ground state properties including lattice parameter, bulk modulus and its pressure derivatives for the four considered crystal structures, fluorite, rutile, pyrite and marcasite are calculated.

The elastic constants of this dioxide  $\text{RuO}_2$ ,  $\text{CeO}_2$  and  $\text{ZrO}_2$  in different stable phases are determined by using the total energy variation with strain technique. The elastic modulus, shear modulus ( $G$ ), young's modulus ( $E$ ), and Poisson's ratio ( $\nu$ ) are calculated. The Debye temperature ( $\theta_D$ ) and sound velocities ( $V_m$ ) were also derived from the obtained elastic modulus. The objective for the proposition of the new materials. Our results for the band structure and the density of states (DOS), show that the Ruthénium oxide is a Semiconductor behavior for the fluorite structure and a metallic character for rutile and the same for the two oxides which are semiconductors in these phases.

It is our ambition that these calculations will inspire further experimental research on this compound.

### ملخص

قمنا بالدراسة النظرية للاستقرارات الهيكلية الميكانيكية و الخصائص الإلكترونية للمؤكسدات التالية  $\text{RuO}_2$ ،  $\text{CeO}_2$ ،  $\text{ZrO}_2$  باستخدام طريقة FP-LMTO على قاعدة (DFT) مع استخدام تقريبية (LDA) التي استطعنا من خلالها تحديد كل الخصائص الهيكلية الميكانيكية و الإلكترونية في حالة مستقرة و معاملات وحدة الخلية معامل الإنضغاطية و مشتقاته للهيكل الأربعة المختلفة قد حسبت. الثواب المرنة  $\text{RuO}_2$ ،  $\text{CeO}_2$ ،  $\text{ZrO}_2$  في مختلف الهياكل مستقرة قد تم تحديدها بمعاملات الرجوعية المرنة للمواد الكريستالات تم تحديدها. وقد تم حساب درجة حرارة ديباي و سرعة الصوت المتوسطة من قيم معاملات الرجوعية المرنة التي تم الحصول عليها.

وفي الهدف اقتراح مواد جديدة ذات صلابة.

طموحنا إن هذه الحسابات سوف تلهم البحوث التجريبية الجديدة لهذا النوع من المركبات.