Thèse de Doctorat en Sciences Physiques
Intitulé: Étude de la structure électronique de CSi_2N_4 pour déterminer l'origine de la dureté intrinsèque de ce composé
Présenté par: HADDOU Abdelghani.
e-mail:haddou_ab@yahoo.fr

Résumé / Abstract / الملخص

Les propriétés mécaniques, optoélectronique et thermodynamiques du composé nitrure de silicium carbone spinelle ont été calculées en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité. Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité avec l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé de Perdew–Burke et Ernzerhof (PBE-GGA). De plus l'approximation du gradient généralisée d'Engel–Vosko (EV-GGA) et le potentiel modifié de Becke–Johnson (TB-mBJ) ont été aussi appliqués pour améliorer les calculs électroniques de la structure de bande. Les propriétés de l'état fondamental y compris le module de compressibilité sont en bon accord avec les données théoriques disponibles. Les constants élastiques, module de Young, module de cisaillement et le coefficient de Poisson ont été détermines en utilisant le variation de l'énergie totale en fonction des contraintes appliquées. À partir des paramètres élastiques on déduit que ce composé est fragile dans la nature. Les résultats de la structure de bande électronique montrent que CSi_2N_4 possède un gap direct (C–C). L'approximation TB-mBJ donne un gap élevé compare avec celui des approximations LDA, PBEGGA, et EV-GGA.de plus on à calculé les propriétés optiques à savoir les partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique, l'indice de refraction, le coefficient d'extinction, la réflectivité et la fonction des pertes d'énergie pour des radiations supérieures à 40.0 eV. En utilisant le model de Debye quasi harmonique qui prend en charge les effets phononiques, l'effet de la pression P, de la température T sur le paramètre du réseau, le module de compressibilité, le coefficient de l'expansion thermique, la température de Debye et la capacité calorifique de ce composé ont été calculés pour la première fois.

Mots-clés: FP-LAPW; DFT; GGA, Propriétés thermiques, Propriétés optiques.

The mechanical, optoelectronic, and thermodynamic properties of carbon silicon nitride spinel compound have been investigated using density functional theory. The exchange–correlation potential was treated with the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation of Perdew–Burke and Ernzerhof (PBE-GGA). In addition, the Engel–Vosko generalized gradient approximation (EV-GGA) and the modified Becke–Johnson potential (TB-mBJ) were also applied to improve the electronic band structure calculations. The ground state properties, including lattice constants and bulk modulus, are in fairly good agreement with the available theoretical data. The elastic constants, Young's modulus, shear modulus, and Poisson's ratio have been determined by using the variation of the total energy with strain. From the elastic parameters, it is inferred that this compound is brittle in nature. The results of the electronic band structure show that CSi_2N_4 has a direct energy band gap (C–C). The TB-mBJ approximation yields larger fundamental band gaps compared to those of LDA, PBEGGA, and EV-GGA. In addition, we have calculated the optical properties, namely, the real and the imaginary parts of the dielectric function, refractive index, extinction coefficient, reflectivity, and energy loss function for radiation up to 40.0 eV. Using the quasi-harmonic Debye model which considers the phononic effects, the effect of pressure P and temperature T on the lattice parameter, bulk modulus, thermal expansion coefficient, Debye temperature, and the heat capacity for this compound were investigated for the first time.

Key-words: FP-LAPW; DFT; GGA, Thermal properties.

قمنا بدراسة الخصائص الميكانيكية، الكهروضوئية، و الحرارية لمركب أزوت السيلكون الكربوني و ذلك باستعمال نظرية الكثافة الوظيفية. كمون الارتباط و التبادل تمت معاملته بتقريب الكثافة المحلية (LDA)و تقريب الانحدار المعمم لـ Perdew–Burke و Ernzerhof و التي يرمز إليها بـ (PBE-GGA). إضافة إلى ذلك تقريب Engel–Vosko إنجل فوسكو للانحدار المعمم و كمون بيك جونسون المحسن Becke–Johnson تم استعمالهما لتحسن حسابات عصابات الطاقة الالكترونية. خواص المركب في حالته الأساسية مثال ثابت البنية، معامل الانضغاطية، وجدت في توافق كبير مع المعطيات النظرية الموجودة. قمنا بحساب معاملات المرونة،

معامل يونغ، معامل القص، و معامل بواسون و ذلك باستعمال تغير الطاقة الكلية مع قوة الشد. من المعطيات المرونية قمنا باستنتاج أن هذا المركب هش في الطبيعة. نتائج الحسابات الالكترونية لعصابات الطاقة تبين أن المركب CSi_2N_4 يمتلك عصابة طاقة ممنوعة مباشرة (C–C) . وجدنا كذلك أن تقريب TB-mBJ يعطي عصابة طاقة ممنوعة أكبر من تقريبات LDA، PBEGGA و EV-GGA . إضافة إلى ذلك قمنا بحساب الخواص الضوئية و خاصة القسم الحقيقي و التخيلي لدالة العازل الكهربائي، معامل الانعكاس، معامل الانطفاء، الانعكاسية، و دالة الضياع في الطاقة و ذلك من أجل إشعاعات طاقتها أكبر من 40.0 إلكترون فولت. باستعمال النموذج شبه التوافقي لدباي و الذي يأخذ بعين الاعتبار العوامل الفنونية قمنا بدراسة مفعول الضغط و الحرارة على ثابت البنية، قمنا بحساب معامل الانضغاطية، معامل التمدد الحراري، درجة حرارة ديباي و السعة الحرارية لهذا المركب و ذلك لأول مرة.

الكلمات المفاتيح: FP-LAPW، DFT ، GGA، الخصائص الحرارية.الخصائص الضوئية.