



**RESUME D'UNE THESE DE
DOCTORAT
(Anglais, français et arabe)**

Nom et Prénom du candidate : BENAYAD NAWEL

Intitulé du Sujet : « Etude des propriétés structurales et électroniques des matériaux lamellaires $M_{n+1}AX_n$ (M=Ti, A=In et X= C ou N avec n = 1, 2 ou 3).

Spécialité : Physique.

Option : Physique Des Matériaux Magnétiques.

Directeur de thèse : RACHED Djamel.

Soutenue le: 08/ 01/ 2012.

E- mail: Dr.Benayad @ yahoo.fr

Abstract

The electronic structure and chemical bonding of the layered ternary compounds Ti_2InC , Ti_3InC_2 , Ti_4InC_3 , Ti_2InN , Ti_3InN_2 and Ti_4InN_3 have been calculated by the *ab initio* Full potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method based on the local density approximation (LDA). The calculated ground state properties, including, lattice constants, internal parameters, bulk modulus and the pressure derivative of the bulk modulus are in reasonable agreement with the available data. The effect of pressure, up to 40 GPa, on the lattice constants and volume is also investigated. The band structure and the density of states

(DOS) show that these materials have a metallic character and Ti_2InN , Ti_3InN_2 and Ti_4InN_3 is more conducting than Ti_2InC , Ti_3InC_2 and Ti_4InC_3 . The analysis of the site and momentum projected densities shows that the bonding is achieved through a hybridization of Ti-atom d states with C (N)-atom p states. Otherwise, it has been shown that Ti-C and Ti-N bonds are stronger than Ti-In bonds.

Résumé

La structure électronique et la liaison chimique des nanolaminaires Ti_2InC , Ti_3InC_2 , Ti_4InC_3 , Ti_2InN , Ti_3InN_2 et Ti_4InN_3 ont été étudiés en utilisant La méthode linéaire des orbitales muffin-tin (LMTO) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Le calcul des propriétés structurales, constantes de réseaux, incluant, paramètres internes, bulk modulus et la dérivée du bulk moulus sont raisonnablement en bon accord avec résultats cités. Comme on a étudié l'effet de la pression jusqu'à 40 GPa, sur les constantes de réseau et le volume. La structure de bande et la densité d'états montrent que ces matériaux ont un caractère métallique et que Ti_2InN , Ti_3InN_2 et Ti_4InN_3 sont plus conducteurs que Ti_2InC , Ti_3InC_2 and Ti_4InC_3 . L'analyse de la densité totale et partielle illustre une hybridation des états d de l'atome Ti avec les états p des atomes C et N. pour cela, il est montré que les liaisons entre $Ti-C$ et $Ti-N$ sont plus importante que les liaisons entre $Ti-In$.

تلخيص

الخاصة الالكترونية و الرابطة الكيميائية للمواد Ti_2InN , Ti_4InC_3 , Ti_3InC_2 , Ti_2InC و Ti_4InN_3 و Ti_3InN_2 درسوا باستعمال طريقة FP-LMTO باستخدام الطريقة التقريبية LDA. تحصلنا على نتائج موافقة للنتائج التجريبية و النظرية الاخرى. كما درسنا تاثير الصغط الى غاية 40 Gpa, على ثوابت الشبكة و الحجم. اما خاصة العصبية و الكثافة تبين ان هذه المواد تتميز بخاضة المعادن حيث Ti_4InN_3 و Ti_3InN_2 , Ti_2InN هم اكثر نواقل من Ti_4InC_3 , Ti_3InC_2 , Ti_2InC . بتحليل الكثافة العامة و الجزئية تبين انشطار في حالة d لدرية Ti مع p لدرتي C و N. لهذا تبين ان الرابطة بين Ti-C و Ti-N اكثر اهمية من الرابطة بين Ti-In.