

Thèse de doctorat en Physique

« First –Principles Study of Structural and Optical Properties of PtN<sub>2</sub>, IrN<sub>2</sub> and PtC<sub>2</sub> With Pyrite and Fluorite Structures »

Par: BETTAHAR Nour Eddine

## Résumé

Nous présentons les résultats d'une étude théorique des propriétés structurales et optoélectroniques des matériaux PtN<sub>2</sub>, PtC<sub>2</sub> et IrN<sub>2</sub> en utilisant la méthode FP-LMTO.

Dans cette approche, l'approximation de densité locale (LDA) est utilisée pour le potentiel d'échange et de corrélation.

L'énergie totale calculée nous a permis le savoir sur plusieurs propriétés structurelles, en particulier la constante du réseau, module de compressibilité, le dérivé du module de compressibilité. La stabilité de phase a été déterminée à partir de calcul d'énergie totale pour les deux phases pyrite (C2) et fluorine (C1).

Un calcul numérique de premiers principes des constantes élastiques a été utilisé pour calculer C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub> et C<sub>44</sub> Nous avons estimé la température de Debye de PtN<sub>2</sub>, PtC<sub>2</sub> et IrN<sub>2</sub> pour différentes vitesses moyennes du son.

La structure de bande, la densité d'états et des masses effectives sont également donnés.

D'autre part, un calcul précis des fonctions diélectriques est effectué dans l'intervalle d'énergie à 13,5 eV.

Les résultats obtenus sont comparés avec d'autres calculs et mesures expérimentales.

## Abstract

We present the results of a theoretical study of the structural and optoelectronic properties of PtN<sub>2</sub>, PtC<sub>2</sub> and IrN<sub>2</sub> using the full-potential linearized muffin-tin orbital method (FP-LMTO). In this approach, the local density approximation (LDA) is used for the exchange correlation potential. The calculated total energy allowed us to investigate several structural properties in particular the lattice constant, bulk modulus, pressure derivative of bulk modulus. The phase stability was determined from total energy calculations for both the pyrite (C2) and fluorite (C1) phases.

A numerical first-principles calculation of the elastic constants was used to calculate C<sub>11</sub>, C<sub>12</sub> and C<sub>44</sub>. We estimated the Debye temperature of PtN<sub>2</sub>, PtC<sub>2</sub> and IrN<sub>2</sub> from the average sound velocity. Band structure, density of states, band gap pressure coefficients and effective masses are also given.

On the other hand, an accurate calculation of linear optical functions (the dielectric function,

refraction index and reflectivity  $R(\omega)$  ) is performed in the photon energy range up to 13.5 eV. The results obtained are compared with other calculations and experimental measurements.