

Résumé de thèse de Doctorat intitulé

Investigation Théorique de Propriétés Structurales, Electroniques et Thermiques des composés Ti_2AlX ($X=C, N$)

Présenté par

Djedid Ahmed Le 13-01-2011

Email

adjedid 22@yahoo.fr

Résumé / Abstract /

Nous avons effectué des calculs du premier principe de l'énergie totale sur les propriétés structurales et électroniques de la série de composés Ti_2AlC et Ti_2AlN et qui sont des phases de Hägg, ou simplement phases H. Nous avons appliqué la méthode des ondes planes linéairement augmentées à tout électron (FP-LAPW), et qui est basée sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA) et/ou l'approximation du gradient généralisée (GGA). Le modèle quasi-harmonique de Debye, en utilisant l'ensemble des calculs de l'énergie totale en fonction du volume obtenus avec la méthode de FP-LAPW est appliqué pour étudier les effets thermiques et vibratoires. Les effets de la température et de la pression sur les paramètres structuraux, la dilatation thermique, la capacité calorifique et la température de Debye sont déterminés à partir de la fonction de Gibbs de non-équilibre.

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

We have carried out a first-principles total-energy calculations of the structural and the electronic properties for the series of H-phases compounds Ti_2AlC and Ti_2AlN . We have applied the full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) method based on the density functional theory (DFT) using the local-density approximation (LDA) and/or the generalized gradient approximation (GGA). The quasi-harmonic Debye model, using a set of total energy versus volume calculations obtained with the FP-LAPW method which is applied to study the thermal and vibrational effects. Temperature and pressure effects on the structural parameters, thermal expansions, heat capacities and Debye temperatures are determined from the non-equilibrium Gibbs functions.

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

Ti_2AlN Ti_2AlC (FP-LAPW) / (LDA) (DFT) (Debye) (Gibbs) (H-phases) (GGA) (FP-LAPW)

•GGA • DFT• FP-LAPW: