

THESE DE DOCTORAT

Intitulé

Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques des pérovskites à base de Fluor par la méthode FP-LAPW

Meriem.HARMEL*

* Département de physique, Université DjillaliLiabes de Sidi Bel Abbès, Algérie

Adresse Email : harmeriem@yahoo.fr

Résumé

Nous avons effectué des calculs du premier principe de l'énergie totale sur les propriétés structurales, électroniques et optiques de la série des composés CsMF_3 ($M=\text{Be, Mg, Ca et Sr}$) et qui sont des matériaux de structures pérovskites. 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). Les parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$, l'indice de réfraction $n(\omega)$ et le coefficient d'extinction $k(\omega)$ sont calculées. 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 capacité calorifique et la température de Debye sont déterminés à partir de la fonction de Gibbs de non-équilibre.

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

Abstract

We have carried out a first-principle total-energy calculations of the structural, electronic and optical properties for the series of compounds $CsMF_3$ ($M=Be, Mg, Ca$ and Sr), which are materials with a perovskite structure. 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 real and imaginary parts of the dielectric function $\epsilon(\omega)$, the refractive index $n(\omega)$ and the extinction coefficient $k(\omega)$ are calculated. 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, heat capacities and Debye temperatures are determined from the non-equilibrium Gibbs functions.

Key-words: FP-LAPW; DFT; Fluoroperovskite; Optical; thermal properties.

المخلص

قمنا بإجراء حسابات المبدأ الأول للطاقة الكلية لإيجاد الخصائص البنيوية (وسيط الشبكة، معامل الإنضغاطية و مشنقته) والالكترونية (بنية عصابات الطاقة، كثافة الحالات) والبصرية لسلسلة المواد $CsMF_3$ ($M=Be, Mg, Ca, Sr$) التي هي مواد تتبلور في هياكل perovskites. قمنا بتطبيق طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا بكل الالكترونات (FP-LAPW) والتي تركز على نظرية كثافة الدالية (DFT) و باستعمال تقريب الكثافة المحلية (LDA) و / أو تقريب التدرج المعمم (GGA). الاجزاء الحقيقية و الوهمية للدالة العازلة، $\epsilon(\omega)$ معامل الانكسار $n(\omega)$ و معامل الانقراض $k(\omega)$ تم حسابها. نموذج ديبي (Debye) الشبه منسجم و باستعمال مجموع حسابات الطاقة الكلية بدلالة الحجم المتحصل عليها بطريقة (FP-LAPW) يطبق لدراسة الآثار الحرارية و الموجية. آثار درجة الحرارة و الضغط على الخصائص البنيوية، التمدد الحراري، السعة الحرارية و درجة حرارة ديبي (Debye) يحصل عليهم من خلال دالة جيبس (Gibbs) لعدم التوازن.

الكلمات-المفتاح: FP-LAPW، DFT، Fluoroperovskite، الخصائص البصرية و الحرارية.