

Nom et Prénom : Baraka Oussama.

Sujet de recherche : Etude de la structure électronique des phases de laves à base des terres rares de types BaM_2 ($M = Rh, Pd$ et Pt).

Domaine : Science de la Matière.

Filière : Sciences des Matériaux.

Intitulé de la formation : Modélisation et simulation numérique.

email : baraka.ou@hotmail.com.

Abstract :

Laves phases is the key to new technology. They are seriously considered in many practical applications. .

In this work, we will presented the study of structural, electronic and elastic properties of Laves phase based on rare earth type BaM_2 ($M = Rh, Pd, Pt$). For this, we used the method of linear augmented plane wave (FPLAPW) based on density functional theory (DFT).

We studied the structural properties, we calculated the formation energy to prove the existence of these compounds experimentally and the cohesive energy to determine the energy required to disassemble into its component parts, then the electronic properties. And finally, we calculated the elastic constants.

Keywords: Density functional theory, Crystal structure, Laves phase, Elastic properties.

Résumé :

Les phases de laves sont la clé de la nouvelle technologie. Ils sont sérieusement pris en considération pour de nombreuses applications pratiques.

dans ce travail; Nous allons présenter l'étude des propriétés structurales, électroniques et élastiques des phases de Laves à base de terre rare BaM_2 ($M = Rh, Pd, Pt$). Pour cela, nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FPLAPW) basé sur La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).

Nous avons étudié les propriétés structurales, puis l'énergie de formation pour prouver l'existence de ces composés expérimentalement et l'énergie de cohésion pour déterminer l'énergie nécessaire pour le désassembler en ses parties constituantes, ainsi que les propriétés électroniques. Et enfin, nous avons calculé les constantes élastiques.

Mots-clés: DFT, la structure cristalline, les phase de Laves, les propriétés élastiques.

ملخص:

Les phases de laves هي مفتاح التكنولوجيا الحديثة. وقد أخذت هذه المواد على محمل الجد لاستعمالها في مختلف التطبيقات العملية .

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والمرئية لبعض مواد BaM_2 phases de laves على أساس عناصر الأرض النادرة. لهذا استخدمنا طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً (FPLAPW) والتي تركز على نظرية كثافة الدالية (DFT) .

قمنا بحساب الخواص البنيوية (ثابت الشبكة، ثابت الصلابة، طاقة التشكيل و التماسك) والميكانيكية (ثوابت المرنة) ، بالإضافة إلى الخواص الإلكترونية (عصابات الطاقة وكثافة الحالات).

الكلمات الرئيسية : نظرية كثافة، الدالية البنية البلورية، phases de laves ، ثوابت المرنة.