



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr : EL HAOUA Mohamed

Soutiendra : le 11/12/2021 à 10H

Lieu : Centre de Visioconférence

Une thèse intitulée :

*Etude des propriétés physiques des composés à bases de phosphures, de nitrures et de matériaux
Anti -pérovskites*

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Sciences des Matériaux et procédés industriels : (SMPI)

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr REZZOUK Abdellah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr BENZAKOUR Najib	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Co-directeur de thèse	Pr HOURMATALLAH Ahmed	PES	Ecole Normale Supérieure - Fès
Rapporteurs	Pr KEROUAD Mohamed	PES	Faculté des Sciences - Meknès
	Pr ARCHOUI Hamid	PES	Faculté des Sciences- Meknès
	Pr BOUSLYKHANE Khalid	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Membres	Pr AHAITOUF Ali	PES	Faculté des Sciences Techniques - Fès
	Pr MASROUR Rachid	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

Résumé :

Dans cette thèse nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques, thermodynamiques et thermoélectriques des composés à bases de métaux de transition en se basant sur deux approches : la théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) et la simulation de Monte Carlo. Notre travail est subdivisé en trois parties :

La première partie consacré à l'étude des propriétés des mono-nitrides et des mono-phosphures des métaux de transition *TMXs* ($TM = Cr, Mo, Co, Ni$ et $X = P, N$). Les *TMXs* sont étudié dans la structure zinc blende (*ZB*). Les résultats obtenus montrent que les deux *TMPs* ($TM = Cr, Mo$) sont stables dans la phase ferromagnétique (*FM*) et les *TMNs* ($TM = Co, Ni$) sont stables dans la phase non magnétiques (*NM*). La densité d'états (*DOS*) et les structures de bandes dans l'approche *GGA*, les *TMXs* montrent un comportement métallique. Dans l'approche *GGA + U*, *CrP* devient semi-métallique et *MoP* conserve leur comportement métallique. Les fréquences de phonons calculées des *TMXs* sont positives et reflètent la stabilité dynamique de ces composés. Les constants élastiques calculés et leurs paramètres dérivés des *TMXs* satisfont aux critères de stabilité de Born-Huang et indiquent que ces composés sont ductiles et stable mécaniquement. Pour les propriétés thermoélectriques (*TE*) des *TMNs*, les résultats obtenus montrent que ces propriétés diminuent avec l'augmentation de la température. À 300 K , les *TMNs* présentent un coefficient Seebeck, une conductivité électrique et un facteur de puissance élevés. Les valeurs calculées du facteur de mérite sont respectivement de 0.75 et 0.797 pour le *CoN* et le *NiN* à 300 K , ce qui en fait des matériaux prometteurs pour les applications thermoélectriques.

Dans la deuxième partie, les propriétés structurales, électroniques, magnétiques et thermoélectriques (*TE*) de $Cr_{1-x}Al_xP$ ($0 \leq x \leq 1$) ont été réalisées. Les résultats obtenus montrent que *CrP* est ferromagnétique avec un moment magnétique total de $3\mu_B$. *DOS* montrent un comportement métallique pour $x = 0$, semi-métallique pour $x = 0.25, 0.5$ et 0.75 , et semi-conducteur pour $x = 1$. Les propriétés *TE* indiquent que $Cr_{1-x}Al_xP$ sont des matériaux de type *n* et que le dopage a une grande influence sur les propriétés thermoélectriques.

Dans la troisième partie, Nous avons analysé les propriétés structurales, électroniques, magnétiques, élastiques et thermodynamiques de l'anti-pérovskite Ni_4N . L'étude structurale expose la stabilité de la configuration ferromagnétique du composé. De plus, les calculs de *DOS* et de structure de bande montrent un comportement métallique du Ni_4N . Les constants élastiques, la dispersion des phonons et les états de densité des phonons montrent que le composé Ni_4N stable mécaniquement et dynamiquement. Les exposants critiques de Ni_4N obtenus par simulation Monte Carlo sont fortement en accord avec le modèle *3D-Ising* autour de la température critique T_C . La valeur obtenue de T_C en bon accord avec les travaux expérimentaux et théoriques.

Mots-clés: *DFT* ; Semi-conducteur; Demi-métal ; Propriétés thermoélectriques ; Propriétés élastiques ; Simulation de Monte-Carlo

Study of the physical properties of compounds based on phosphides, nitrides and anti-perovskite materials

Abstract:

In this thesis we have studied the structural, electronic, magnetic, elastic, thermodynamic and thermoelectric properties of compounds based on transition metals based on two approaches: density functional theory (*DFT*) and Monte Carlo simulation. Our work is subdivided into three parts:

The first part devoted to the study of the properties of mono-nitrides and mono-phosphides of transition metals *TMXs* ($TM = Cr, Mo, Co, Ni$ and $X = P, N$). *TMXs* are studied in the zinc blende (*ZB*) structure. The results obtained show that the two *TMPs* ($TM = Cr, Mo$) are stable in the ferromagnetic phase (*FM*) and the *TMNs* ($TM = Co, Ni$) are stable in the non-magnetic phase (*NM*). Density of states (*DOS*) and band structures in the *GGA* approach show that *TMXs* have metallic behavior. In the *GGA + U* approach, *CrP* becomes semi-metallic and *MoP* retains their metallic behavior. The calculated phonon frequencies of *TMXs* are positive and reflect the dynamic stability of these compounds. The calculated elastic constants and their parameters derived from the *TMXs* satisfy the Born-Huang stability criteria and indicate that these compounds are ductile and mechanically stable. For the thermoelectric properties (*TE*) of *TMNs*, the results show that these properties decrease with increasing of temperature. At 300 K, *TMNs* exhibit a high Seebeck coefficient, electrical conductivity and power factor. The calculated figure of merit values are 0.75 and 0.797 for *CoN* and *NiN* at 300K, respectively, making them promising materials for thermoelectric applications.

In the second part, the structural, electronic, magnetic and thermoelectric (*TE*) properties of $Cr_{1-x}Al_xP$ ($0 \leq x \leq 1$) were realized. The results obtained show that *CrP* is ferromagnetic with a total magnetic moment of $3\mu_B$. *DOS* show metallic behavior for $x = 0$, semi-metallic for $x = 0.25, 0.5$ and 0.75 , and semiconductor for $x = 1$. The *TE* properties indicate that $Cr_{1-x}Al_xP$ are *n*-type materials and that the doping has a great influence on the thermoelectric properties.

In the third part, we analyzed the structural, electronic, magnetic, elastic and thermodynamic properties of anti-perovskite Ni_4N . The structural study exposes the stability of the ferromagnetic configuration of the compound. Additionally, *DOS* and band structure calculations show metallic behavior of Ni_4N . The elastic constants, the phonon dispersion and the phonon density states show that the compound Ni_4N is mechanically and dynamically stable. The critical exponents of Ni_4N obtained by Monte Carlo simulation are strongly in agreement with the 3D-Ising model around the critical temperature T_C . The value obtained from T_C in good agreement with others experimental and theoretical works.

Keywords: DFT; Semiconductor; Half metal; Thermoelectric properties; Elastic properties; Monte-Carlo simulation