



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **JOGHLAF Mohammed**
Soutiendra : le **Mercredi 10/01/2024 à 10H30**
Lieu : **FSDM – Centre Visioconférence**

Une thèse intitulée :

The Behavior of Cohesive Energy and the Study of Molar Heat Capacity in Solids
سلوك طاقة الترابط ودراسة السعة الحرارية المولية في المواد الصلبة

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : **Sciences des Matériaux et Procédés Industriels**
Spécialité : **Sciences des Matériaux pour l'Energie et l'Environnement**

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr LACHKAR Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr JABER Boujemâa	Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique, Rabat	PES	Rapporteur & Examineur
Pr ALAMI Mohammed	Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Meknès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr NAJI Mohamed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PH	Rapporteur & Examineur
Pr FILALI Mohammed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr SAYOURI Salaheddine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Membre Invité
Pr ABABOU Yahya	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé :

L'objectif principal visé dans le cadre de la préparation de la présente thèse était d'établir une expression de l'évolution thermique de l'énergie de cohésion en exploitant la relation entre l'énergie de cohésion et l'énergie de pompage de chaleur par sous-fusion (de la température zéro Kelvin au seuil minimum de température de fusion). L'approche a consisté en l'utilisation d'un ajustement statistique linéaire, communément appelé équation de régression linéaire. Le coefficient de corrélation statistiquement linéaire calculé, pour les semi-conducteurs suivants : C (Diamant), Si, Ge, SiC, ZnS, ZnTe, CdS et CdTe, à l'aide des programmes informatiques MatLab et Visual Basic s'est avéré proche de l'unité, indiquant une forte corrélation entre les valeurs de l'énergie de cohésion et de l'énergie de sous-fusion.

A cette fin, nous avons proposé une nouvelle méthode qui a consisté en la combinaison des modèles d'Einstein et de Debye, connus pour la capacité thermique molaire à volume constant (cv), en un seul modèle (mixte) où nous avons adopté les modèles de Debye et d'Einstein respectivement pour les branches acoustiques et optiques de la relation de dispersion vibratoire. De plus, l'intégration résultant de ce modèle mixte a été résolue analytiquement en obtenant une relation exacte sans terme intégrale en utilisant des fonctions polylogarithmiques. Nous avons utilisé ce modèle mixte pour calculer les valeurs de l'énergie de pompage de chaleur par sous-fusion et avons réussi à dériver la fonction d'énergie de cohésion dépendante de la température. En outre, et dans un souci de généralisation du modèle à tous les matériaux solides pour le calcul de la capacité thermique molaire à volume constant, nous avons appliqué cette approche aux matériaux évoqués ci-dessus en plus de NaCl et Cu, et ce après avoir supprimé la contribution électronique à cv.

Comme résultat secondaire de cette recherche, nous avons pu obtenir une relation mathématique satisfaisante qui donne avec grande précision la constante de force d'étirement de la liaison dans diverses structures et sous différentes hypothèses en termes de paramètres et de quantités macroscopiques telles que la constante de réseau à l'équilibre et le module de volume.

En vue de mieux comprendre la matière à l'échelle microscopique et relier les paramètres qui lui sont inhérents à ceux à l'échelle macroscopique, il convient de noter que l'énergie de cohésion, la constante de force d'étirement de la liaison et la température sont liées à de nombreux paramètres et quantités, tels que la constante de force de flexion de la liaison, la température de Debye et les énergies de sous-fusion et de fusion.

Mots clés :

Constante de force interatomique d'étirement de liaison ; Capacité thermique molaire ; Modèle mixte Einstein–Debye ; Modélisation en programmation informatique ; Énergie de pompage de chaleur sous-fondante ; Énergie cohésive.



THE BEHAVIOR OF COHESIVE ENERGY AND THE STUDY OF MOLAR HEAT CAPACITY IN SOLIDS

Abstract:

The main objective of this research was to establish an analytical expression for the thermal behavior of the cohesive energy by leveraging the relation between the cohesive energy and sub-fusion heat-pumping energy (from zero Kelvin temperature to the minimum threshold of fusion temperature) that we have also constructed. This was achieved through the use of linear statistical fitting, commonly known as linear regression equation. The calculated statistically linear correlation coefficient, for the following semiconductors: C (Diamond), Si, Ge, SiC, ZnS, ZnTe, CdS and CdTe, with the help of MatLab and Visual Basic computer programs, was found to be close to unity, indicating a strong correlation between the values of cohesive energy and sub-fusion energy.

With the aim of accomplishing the main task mentioned above, we proposed a new method which consisted of the combination of the Einstein and Debye models, known for the molar heat capacity at constant volume (c_v), in one (mixed) model in which we relied on Debye's methodology to describe the acoustic branches of the vibrational dispersion relation, while adopting Einstein's approach to characterize its optical branches. Furthermore, the integration resulting from this mixed model was solved analytically obtaining an exact integral-free expression by using polylogarithm functions. We used This mixed model to calculate the values of sub-fusion heat-pumping energy and successfully derived the temperature-dependent cohesive energy function. In addition, and in order to generalize the model to all solid materials for the calculation of the molar heat capacity at constant volume, we applied this approach to the materials mentioned above in addition to NaCl and Cu, after removing the electronic contribution to c_v .

As a side result of this research, we were able to obtain a satisfactory mathematical relation that gives accurate bond-stretching force constant in various structures and under different assumptions in terms of macroscopic parameters and quantities such as the equilibrium lattice constant and the bulk modulus.

In order to better understand matter on the microscopic scale, and relate the parameters inherent to it to those on the macroscopic scale, it is also worth noting that the cohesive energy, the bond-stretching force constant and temperature are related to many parameters and quantities such as the bond-bending force constant, the Debye temperature, the sub-fusion energy and the fusion energy.

Key Words:

Bond-Stretching Interatomic Force Constant; Molar heat capacity; Mixed Einstein–Debye model; Computer programing modelling; Sub-fusing heat-pumping Energy; Cohesive Energy.