



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEM

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique la Matière Condensée

.....

Par :

Mme MESSIRDI Wafaa

Sur le thème

Etude des propriétés structurales, électroniques mécaniques et magnétiques des mono carbures des terres rares

Soutenu publiquement le 19/10/2023. à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr RERBA Benali	MCA	Université de Tlemcen	Président
Mme Abderrahim Fatima Zohra	MCA	Université de Chlef	Encadrante
Mme SAIDI Fatiha	MCA	ECGEE-Oran	Examinatrice

Année Universitaire : 2022-2023

Dédicace

Je dédie mon travail à mon cher papa et ma chère maman, Que dieu vous protège, prenne soin de vous et vous récompense bien en notre nom.

A mon merveilleux mari, je dédie ce diplôme, il a été le plus grand supporter en tout, alors merci beaucoup pour votre confiance dans mon succès et pour m'avoir poussé vers le meilleur.

A mes frères qui parcourt mon ciel et m'éclaire de bonheur (Nesrine, Azzedine, Insaf, Nihel et meriem).

A ma belle famille pour leurs bons vœux de réussite, de soutien, et d'encouragement.

A mes enfants Racim et Yanis, en espérant être toujours pour eux une source de fierté et de force.

Remerciement

Je remercie en premier le bon Dieu pour tous ses bienfaits et de m'avoir donné la patience d'accomplir ce travail de mémoire.

Ce travail est réalisé au sein de la Division Etude et Prédiction des Matériaux(DEPM) affilié à l'Unité de Recherche Matériaux et Energie Renouvelable (URMER) de l'Université de Tlemcen.

Je tiens d'abord à remercier chaleureusement mon encadreur Madame Abderrahim Fatima Zohra pour m'avoir proposé ce sujet et pour l'avoir accompagné, et pour ses encouragements, ses conseils et ses orientations.

Je remercie Monsieur .Rerbal Benali et Madame.Saidi Fatiha pour l'honneur d'avoir accepté d'être les jurys de ce mémoire.

Je remercie aussi le Doyen de la faculté des sciences Monsieur Arrar Zouheyr.

Mes remerciements à mes parents de m'aider pour tout.

Table de matière :

Dédicaces	
Remerciements	
Introduction générale.....	1
<u>I /chapitre I</u>	2
1-1 définition des terres rares	4
1-2 propriétés des terres rares.....	6
1-3 applications des terres rares.....	6
1-4alliagesdesterresrares.....	7
3- références.....	7
<u>chapitreII :</u>	9
II-1Définitionde la DFT.....	10
II-2Equation de schrodinger.....	10
II-3.1 la densité électronique.....	12
II-3.2 les équations de Kohn et Sham.....	13
II-4 fonctionnelles de la densité électronique.....	13
II-4.1 approximation de la densité local (LDA).....	14
II-4.2 approximation de gradient généralisé (GGA).....	14
II-4 .3 approximation Perdew-Burke-Ernzerhof(GGA-PBE).....	15
II-5 Pseudo potentiel et ondes planes.....	16
II-6 Théorème de Bloch et ondes planes.....	17
II-7 Intégration de la zone de Brillouin et points K.....	19
II-8 Vienna b-initio simulation Package (VASP).....	20

<u>Chapitre III</u> : résultats et discussions.....	22
III-1 : Détail de calculs.....	23
III-2 : propriété structurale.....	25
III-3 : propriété électronique.....	26
III-4 : propriété mécanique.....	29

Liste des figures :

chapitreI :

FigI.1 : les terres rares.....	4
--------------------------------	---

chapitreII :

Fig. II .1 : le potentiel et la fonction d'onde dans le cas réel (ligne continue) et le cas du pseudo potentiel (ligne discontinue).....	16
--	----

Chapitre III :

Fig1 : structure cristalline du CeCet NdC en phase (a)NaCl, (b) Zinc blende,(c)CsCl.....	23
Fig2 : DOS CeC dans la structure NaCl.....	27
Fi3 : DOS NdC dans la structure NaCl.....	28

Liste des tableaux

III-1 configuration électronique du CeC et NdC.....	23
III-2 convergence de KPT pour le carbure CeC.....	24
III-3 convergence de KPT pour le carbure NdC	24

III-4 les valeurs des paramètres de carbures CeC et NdC.....	25
III-5 valeurs du moment magnétiques dans NdC	29
III-6 Constantes élastiques C_{ij} , module de compression (B), module de cisaillement (G) et module de Young (E) en GPa et le coefficient de Poisson (ν) pour les carbures CeC et NdC respectivement.....	31

Introduction Générale

Introduction générale :

Récemment, les terres rares sont des nouveaux matériaux et constituent un groupe d'éléments qui préoccupent le plus les scientifiques nationaux et étrangers, en particulier les experts en matériaux. En raison de leurs propriétés particulières, les terres rares ont été largement utilisées dans les matériaux métallurgiques, l'optique, le magnétisme, l'électronique, les machines, les produits chimiques, l'énergie atomique, l'agriculture et l'industrie légère. Bien que les terres rares soient utilisées comme additifs et modificateurs, leur valeur de production directe et leur profit ne sont pas élevés, mais les avantages économiques secondaires peuvent être multipliés par des dizaines, voire des centaines. Les ressources en terres rares de la Chine sont abondantes, ses réserves se classent au premier rang mondial et sa capacité de production complète se classe au deuxième rang mondial. Au pays et à l'étranger, l'application des terres rares et de leurs composés est presque partout dans l'économie nationale [1]. L'ajout d'éléments de terres rares dans le carbure cimenté non seulement inhibe la croissance des grains de l'alliage pendant le processus de frittage, mais améliore également les propriétés mécaniques de l'alliage, améliorant ainsi encore la durée de vie du produit.

Pour faire une étude sur une nouvelle famille des mono carbures des terres rares, nous avons utilisé une méthode de simulation quantique au sein de la DFT, c'est la méthode de pseudo potentiel qui est installé dans le code VASP.

Dans ce mémoire, on a divisé notre travail en trois chapitres et nous terminons par une conclusion générale. Dans le premier chapitre nous avons défini les terres rares en générale, leurs propriétés et leurs applications ensuite nous avons parlé des alliages à base des terres rares. Pour le deuxième chapitre nous présentons la méthode théorique et nous parlons de quelque théorème de la mécanique quantique et nous parlons de la DFT et sur la méthode pseudo potentiel. Pour le troisième chapitre on a présenté les calculs que nous avons faits sur les propriétés structurales, électroniques, mécaniques et magnétiques des carbures CeC et NdC.

Introduction Générale:

Référence:

[1]Bru K., Christmann P., Labbé J.F., Lefebvre G. (2015) - Panorama mondial 2014 du marché des Terres Rares. Rapport public. BRGM/RP-65330-FR.

Chapitre I

Malgré leur nom, les éléments constituant les terres rares ne sont pas rares. Ce sont des éléments relativement abondants dans la croûte terrestre pour certain (lanthane, néodyme, cérium qui représentent 90 % de la production de terres rares dans le monde) avec la même présence que le cuivre, le plomb ou le zinc, mais un faible nombre de minéraux sont constitués de ces éléments et leurs gisements (concentrations naturelles à des niveaux

CHAPITRE I

économiquement exploitables) sont très localisés. Par ailleurs, la séparation de ces éléments entre eux est difficile du fait de propriétés chimiques proches.

Les terres rares sont divisées en deux groupes : les terres rares légères³ (dont le néodyme qui entre dans la composition des aimants permanents de type NdFeB – Néodyme-Fer-Bore) et les terres rares lourdes (dont le dysprosium qui vient du grec dus-prósitos, « difficile à obtenir » et se trouve également dans l'aimant permanent NdFeB). L'ensemble des différentes terres rares se retrouve généralement dans les différents minerais, mais les terres rares lourdes sont toujours en teneurs plus faibles que les légères (en général, les terres rares lourdes représentent chacune moins de 1 % du total des terres rares contenues dans les minerais, alors que 3 des terres rares légères sont en général présentes entre 18 et 50 % chacune), excepté dans certains gisements caractérisés par des teneurs en terres rares lourdes plus fortes (mais au maximum 7 %).

Les terres rares sont extraites conjointement dans les minerais puis séparées par des procédés chimiques en fonction des usages. L'équilibre économique de la chaîne d'extraction s'appuie sur la valorisation de chacune des terres rares, ce qui induit le fait que chaque terre rare constitue un co-produit des autres. Le tiers de la valeur des terres rares extraites dans le monde provient du néodyme, essentiellement utilisé dans les aimants.

Dans certaines exploitations, les terres rares peuvent être un sous-produit (du fer notamment, pour le plus grand gisement mondial en exploitation en Chine) mais cela reste une exception géologique. Dans tous les cas, la criticité des terres rares n'est pas liée à leur rareté physique dans la croûte terrestre ou à leurs modalités d'exploitation. Elle est essentiellement due à la mauvaise répartition géographique des extractions actuelles, qui se trouvent majoritairement en Chine, ce qui induit un risque d'approvisionnement.

1-2 Propriétés des terres rares :

Les éléments des terres rares sont des substances métalliques assez molles, malléables et ductiles, de couleur blanc argenté à blanc métallique. Ces éléments sont chimiquement assez réactifs, en particulier à des températures élevées ou sous la forme de fragments fins[3]. Ils possèdent des propriétés uniques (oxydo-réductrices, optiques, magnétiques, luminescentes, catalytiques) qui les rendent essentiels dans de nombreuses applications, dont les hautes technologies et les énergies propres

1-3 Applications des terres rares :

En raison de leurs propriétés, les applications des terres rares sont multiples ; voici les principales [3] :

- Aimants permanents (utilisés pour réduire le volume et le poids des moteurs et générateurs électriques)
- Catalyse (pots catalytiques des voitures, craquage pétrolier...): les terres rares jouent un rôle de promoteur dans des zéolithes utilisées comme catalyseur dans le craquage des produits pétroliers.
- Polissage du verre (notamment pour les écrans)
- Certaines batteries
- Certains alliages métallurgiques
- Industries du verre et des céramiques (coloration, décoloration...)
- Des luminophores (lampes, écrans...)
- Les lasers de puissance
- Mais aussi dans l'imagerie médicale, l'énergie nucléaire, la défense...

1.4. Alliage dur de terres rares:

Les terres rares présentent une amélioration évidente des performances du carbure cémenté. Un grand nombre d'études ont montré que l'ajout de terres rares peut améliorer dans une large mesure la résistance et la ténacité du carbure cémenté, de sorte que le carbure cémenté additionné de terres rares peut être largement utilisé dans les matériaux d'outils et les outils miniers. , moules, marteaux-pilons, etc., ont d'excellentes perspectives de développement.

Les terres rares couramment utilisées comme additifs sont Ce, Y, Pr, La, Sc, Dy, Gd, Nd, Sm, etc. La forme d'addition est généralement un oxyde, un métal pur, un nitrure, un hydruure, un carbure, un alliage intermédiaire terre rare-cobalt, un carbonate, un nitrate, etc. Le type et la morphologie de la terre rare ajoutée affectent les propriétés physiques et mécaniques du carbure cémenté.

CHAPITRE I

En raison des différentes manières, formes, types de terres rares et méthodes de recherche, les conclusions de la recherche sont différentes et le mécanisme proposé sera différent et même contradictoire. La recherche sur les carbures cimentés durcis aux terres rares doit être approfondie.

Références:

[1]Office parlementaire d'évaluation des choix scientifiques et technologiques. *Les enjeux des métaux stratégiques : Le cas des terres rares*. Compte rendu de l'audition publique du 8 mars 2011 et de la présentation des conclusions, le 21 juin 2011 par MM. Claude Birraux et Christian Kert, députés.

[3]Terres rares : enjeux stratégiques pour le développement durable. Conférence donnée par Patrice Christmann, directeur adjoint à la Stratégie du BRGM, dans le cadre des Grands Séminaires de l'Observatoire Midi-Pyrénées du CNRS, le 17 septembre 2013.

[4]F. Hulliger, in: K.A. Gscheidner Jr., L. Eyring (Eds.), *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, North-Holland, New York, 4, 1979, (Chapter 33).

Chapitre II

II.1 Définition de la DFT :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une méthode de mécanique quantique (QM) utilisée en chimie et en physique pour calculer la structure électronique des atomes, des molécules et des solides. Depuis les années 1970, elle est très populaire dans le domaine de la physique computationnelle de l'état solide. Toutefois, ce n'est que dans les années 1990 que les améliorations apportées à la méthode lui ont permis d'atteindre une précision acceptable pour les applications de la physique quantique.

II.2 Equation de Schrödinger

A fin d'étudier les propriétés d'un solide composé d'un grand nombre de noyaux et d'électrons on aura besoin d'une résolution de l'équation de Schrödinger mentionnée ci-dessous

$$\mathbf{H}\Psi = \mathbf{E}\Psi \quad (\text{II-1})$$

Avec : $\mathbf{E}$ est l'énergie totale du système

$\mathbf{H}$: est l'Hamiltonien

Ψ : est la fonction d'onde.

$$\mathbf{H}\Psi(\{\mathbf{r}_i\}\{\mathbf{R}_I\}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_I\}, t) \quad (\text{II-2})$$

Le système étant décrit à l'aide d'une fonction d'onde multi-particule $\Psi(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_I\}, t)$

Où l'ensemble $\{\mathbf{r}_i\}$ contient les variables décrivant la position des électrons.

L'ensemble $\{\mathbf{R}_I\}$ celles décrivant la position des noyaux.

$\mathbf{H}$ est l'Hamiltonien du système[1].

L'Hamiltonien total du système comprend plusieurs termes :

Où :

$$(\text{II-3}) \mathbf{H} = \mathbf{T}_e(\mathbf{r}) + \mathbf{T}_N(\mathbf{r}) + \mathbf{V}_{ee}(\mathbf{r}) + \mathbf{V}_{NN}(\mathbf{R}) + \mathbf{V}_{Ne}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

$\mathbf{T}_e$: Les opérateurs d'énergie cinétique des électrons comme le montre l'équation :

Chapitre II:

$$T_e = - \sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \quad (\text{II-4})$$

T_N : L'opérateur d'énergie cinétique des électrons et des noyaux comme le montre l'équation.

$$= - \sum_K^M \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_K^2 \quad (\text{II-5}) T_N$$

V_{ee} : L'opérateur d'énergies potentielles représentant les interactions coulombiennes répulsives entre noyaux comme le montre l'équation.

$$V_{ee} = \sum_{i < j} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II-6})$$

V_{NN} : L'opérateur d'énergies potentielles représentant les interactions coulombiennes répulsives entre noyaux comme le montre l'équation.

$$V_{NN} = \sum_{i < j} U(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \sum_{i < j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (\text{II-7})$$

V_{Ne} : L'opérateur d'énergie d'attraction entre noyaux et électrons comme le montre l'équation.

$$V_{Ne} = \sum_{i < j} \frac{Z_k e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_k|} \quad (\text{II-8})$$

A fin de simplifier l'équation (II-3) Born-Oppenheimer (BO)[2] a proposer une approximation qui consiste a découpler le mouvement des électrons et des noyaux comme ce suit :

$$\Psi \approx \Psi_{BO} = \Psi_{elec} \times \Psi_{noy} \quad (\text{II-9})$$

En fait, la masse des électrons est si petite comparée à la masse des protons qu'on peut imaginer qu'ils se réorganisent instantanément en un endroit donné du noyau. De cette façon, dans le cas où les deux termes de l'équation (3) ne dépendent que du noyau, T_{NN} peut être ignoré et V_{NN} est une constante. On peut alors résoudre l'équation de Schrödinger pour cette position du noyau Les hamiltoniens électroniques et nucléaires ainsi obtenus s'écrivent comme suit:

$$H_{\text{elec}} = T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (\text{II-10})$$

$$H_{\text{noyaux}} = T_N + V_{NN} \approx V_{NN} \quad (\text{II-11})$$

Born-Oppenheimer a été le premier à nous permettre de penser un solide comme un ensemble d'électrons en interaction, mais l'équation de Schrödinger est encore complexe et nécessite d'autres types d'approximations basées sur la théorie du champ moyen, où les électrons sont considérés comme indépendants, comme le approximation Hartree-Fock la plus célèbre [3].

II.3.1 La densité électronique

La théorie de la mécanique quantique stipule que la position d'un électron ne peut être décrite que de manière statistique. Elle décrit également une méthode de calcul de la probabilité de trouver un électron en un point ou un autre. Ce calcul produit une quantité appelée densité électronique, un nombre qui nous indique la probabilité relative de trouver un électron en un point particulier de l'espace [4].

II.3.2 Les équations de Kohn et Sham

Pour obtenir l'énergie de l'état fondamental d'un système électronique à partir de DFT, qui est un outil fiable et pratique, sa formulation s'appuie sur les idées suivantes : Le gaz électronique qui peut être décrit par l'interaction irréelle des particules, représenté par la fonction d'onde d'une particule unique $\Psi_i(\mathbf{r})$, fait apparaître le gaz de particules virtuel égal en densité électronique à l'état fondamental et a donc la même énergie $E[\rho]$ comme un véritable gaz électronique [5].

$$H_{KS} \Psi_i = [T_e(\mathbf{r}) + V_{eff}(\mathbf{r})] \Psi_i = \epsilon_i \Psi_i \quad (\text{II-12})$$

Où : $T_e(\mathbf{r})$ est l'opérateur énergie cinétique des particules fictives sans interaction.

ϵ_i : L'énergie de l'état $\Psi_i(\mathbf{r})$.

$V_{eff}(\mathbf{r})$ est le potentiel effective est s'écrit comme ce suit :

$$\mathbf{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \quad (\text{II-13})$$

$V_H(\mathbf{r})$: Le potentiel de Hartree ou potentiel d'interaction coulombienne classique entre les particules de gaz électronique.

$V_{XC}(\mathbf{r})$: Le potentiel d'échange-corrélation.

Avec :

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (\text{II-14})$$

$$V_{XC}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{XC}[\rho]}{\delta(\mathbf{r})} \quad (\text{II-15})$$

II.4 Fonctionnelles de la densité électronique

La théorie de la mécanique quantique stipule que la position d'un électron ne peut être décrite que de manière statistique. Elle décrit également une méthode de calcul de la probabilité de trouver un électron à un moment donné. Ce calcul produit une quantité appelée densité électronique, un nombre qui nous indique la probabilité relative de trouver un électron en un point particulier de l'espace.[9].

II.4.1 Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale (LDA) est une classe d'approximations de la fonctionnelle énergétique d'échange-corrélation (XC) dans la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) qui dépend uniquement de la valeur de la densité électronique en chaque point de l'espace (par exemple, densité ou dérivée). de l'orbitale Korn-Sham). Un certain nombre d'approches peuvent être utilisées pour obtenir une approximation locale de l'énergie XC. Cependant, l'approximation locale extrêmement réussie est dérivée du modèle de gaz d'électrons homogènes (HEG). À cet égard, LDA est généralement synonyme de

Chapitre II:

fonctionnelles basées sur l'approximation HEG et appliquées à des systèmes réalistes (molécules et solides) [10].

$$E_{XC}^{LDA} = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{XC}(\rho) d\mathbf{r} \text{ (II-17)}$$

Où :

$$\epsilon_{XC}(\rho) = \epsilon_X(\rho) + \epsilon_C(\rho) \text{ (II-18)}$$

E_{XC}^{LDA} : La contribution à l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un gaz homogène [11].

II.4.2 Approximation de gradient généralisée (GGA)

Les approximations modernes du gradient généralisé (GGA) sont biaisées en faveur des énergies atomiques. La restauration de l'expansion du gradient des premiers principes pour l'énergie d'échange sur une large gamme de gradients de densité élimine ce biais. Nous introduisons PBEsol, un GGA Perdew-Burke-Ernzerhof révisé qui améliore les propriétés d'équilibre de nombreux solides densément compactés et de leurs surfaces [12].

$$E_{XC}^{GGA}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(\rho, |\nabla \rho|) d\mathbf{r} \text{ (II-19)}$$

II.4.3 Approximations Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE)

Une nouvelle fonctionnelle d'énergie d'échange non empirique de type approximation du gradient généralisé (GGA), qui donne un potentiel d'échange avec le comportement asymptotique correct, est développée et explorée. En combinaison avec la fonctionnelle d'énergie de corrélation Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), la nouvelle fonctionnelle de corrélation d'échange CAP-PBE (CAP signifie correct asymptotique potentiel) donne les chaleurs de formation, les potentiels d'ionisation, les affinités électroniques, les affinités protoniques, les énergies de liaison de systèmes à faible interaction [13].

$$E_{XC}^{PBE}[\mathbf{r}] = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r}), s(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \text{ (II-20)}$$

Chapitre II:

Où $S = |\nabla| / (2K_F)$ est la réduction de gradient avec $K_F = (3\pi^2\rho)^{1/3}$

$$\epsilon_{XC}(\rho(r), s(r)) = \epsilon_X^{LDA}(\rho(r)) \times F_X^{PBE}(s(r)) \quad (\text{II-21})$$

$$F_X^{PBE}(s) = -\frac{8}{9} \int_0^\infty y dy J^{PBE}(s, y) \quad (\text{II-22})$$

Où $J^{PBE}(s, y)$ est la partie d'échange de la fonctionnelle PBE.

II.5 Pseudo-potentiels et ondes planes :

La première édition de ce livre, publiée en 1994, présentait la méthode LAPW et sa relation avec d'autres approches de la structure électronique, en particulier les méthodes d'ondes planes basées sur Car-Parrinello. Depuis la publication de cet ouvrage, la méthode LAPW est passée d'une méthode spécialisée, utilisée principalement par des chercheurs utilisant leurs propres versions, à une méthode populaire, largement utilisée, où la plupart des utilisateurs utilisent des codes standards pour étudier les matériaux qui les intéressent. Cette évolution est passionnante car elle ouvre la voie à une utilisation généralisée des calculs de premiers principes dans divers domaines de la physique de la matière condensée et de la science des matériaux. L'impact positif de cette évolution sur le progrès scientifique devient déjà évident. En raison de cette tendance, la grande majorité des chercheurs qui utilisent la méthode LAPW ne sont plus directement impliqués dans le développement des codes LAPW. Néanmoins, il reste important de comprendre comment fonctionne la méthode LAPW, quelles sont ses limites et comment ses paramètres déterminent la qualité et l'efficacité des calculs. Le scientifique qui comprend le fonctionnement de la méthode dispose d'un avantage certain. Cette édition est un traitement actualisé et étendu de la méthode LAPW, comprenant des descriptions des développements clés de la méthode LAPW depuis 1994, tels que les orbitales locales p 1/2, la méthode APW-i-LO, les calculs LDA+U et le magnétisme non colinéaire, ainsi qu'une grande partie du matériel de la première édition.[14].

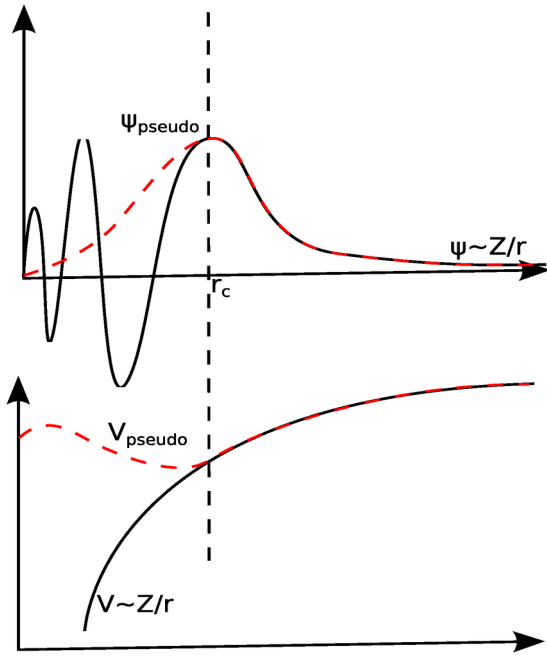


Figure. II.1 : Le potentiel, et la fonction d'onde dans : le cas réel (ligne continue) et le cas du Pseudo potentiel (ligne discontinue).

II.6 Théorème de Bloch et ondes planes :

Une onde de Bloch (également appelée fonction d'état de Bloch ou fonction d'onde de Bloch), du nom du physicien suisse Félix Bloch, est une fonction d'onde qui peut être écrite comme modulée par une onde plane à fonction périodique. Par définition, si une onde est une onde de Bloch, alors sa fonction d'onde Ψ_i peut s'écrire:

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f_i(\mathbf{r}) \quad (\text{II-23})$$

Où $\mathbf{k}$ est un vecteur d'onde de la première zone de Brillouin (noté ZB)[15] du réseau réciproque.

Nous avons le deuxième terme de cette équation qui peut être développé comme une série d'ondes planes, et le vecteur d'onde du réseau réciproque comme ce suit :

$$f_i(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{II-24})$$

Si on combine ces deux équations (II.23) et (II.24) on obtient la fonction d'onde mono-particule écrite sous une somme d'ondes planes :

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}}(\mathbf{K}) e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{II-25})$$

A fin décrire une fonction d'onde mono-particule, il faut donc un nombre infini d'ondes planes.

En réalité ce nombre est limité par l'énergie de coupe notée E_{cut} . Cette énergie de coupure peut restreindre la base à une onde plane vérifiée par le vecteur $\mathbf{K}+\mathbf{G}$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{K} + \mathbf{G}|^2 \leq E_{cut} \quad (\text{II-26})$$

On a m : la masse de l'électron [16].

II.7 Intégration de la zone de Brillouin et points $\mathbf{k}$:

Lorsque la théorie fonctionnelle de la densité est utilisée pour décrire la structure électronique des systèmes périodiques, l'application du théorème de Bloch aux fonctions d'onde de Kohn-Sham facilite grandement les calculs. Dans cet article de la série, les concepts nécessaires à la modélisation de systèmes infinis sont introduits. Celles-ci comprennent la cellule unitaire dans l'espace réel, ainsi que son homologue dans l'espace réciproque, la zone de Brillouin. Les grilles d'échantillonnage de la zone Brillouin et les ensembles finis de points $\mathbf{k}$ sont discutés. Pour les systèmes métalliques, ces outils doivent être complétés par des méthodes permettant de déterminer l'énergie de Fermi et la surface de Fermi. Divers schémas pour élargir la fonction de distribution autour de l'énergie de Fermi sont présentés et les approximations impliquées sont discutées. Afin d'obtenir une interprétation des calculs de structures électroniques en termes de physique, les concepts de structures de bandes et de densité d'états projetés par atomes et/ou par projection orbitale sont utiles. Les aspects de convergence avec le nombre de fonctions de base et le nombre de $\mathbf{k}$ -points doivent être abordés spécifiquement pour chaque propriété physique. L'importance de cette question sera illustrée par les calculs de constantes de force et les simulations des propriétés des matériaux à température finie. Les méthodes développées pour les systèmes périodiques se prolongent, sous quelques réserves, dans des situations moins symétriques en travaillant avec une supercellule. Le chapitre se termine par une perspective de l'utilisation des calculs de supercellules pour les surfaces et les interfaces des cristaux. Les aspects de convergence avec

Chapitre II:

le nombre de fonctions de base et le nombre de k-points doivent être abordés spécifiquement pour chaque propriété physique. L'importance de cette question sera illustrée par les calculs de constantes de force et les simulations des propriétés des matériaux à température finie.[17][18].

II.8 Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)

Le Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) est un programme informatique pour la modélisation des matériaux à l'échelle atomique, par exemple les calculs de structure électronique et la dynamique moléculaire de la mécanique quantique, à partir des premiers principes. VASP calcule une solution approchée de l'équation de Schrödinger à plusieurs corps, soit dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT), en résolvant les équations de Kohn-Sham, soit dans le cadre de l'approximation de Hartree-Fock (HF), en résolvant les équations de Roothaan. Des fonctionnelles hybrides qui mélangent l'approche Hartree-Fock avec la théorie de la fonctionnelle de densité sont également implémentées. De plus, les méthodes des fonctions de Green (quasiparticules GW et ACFDT-RPA) et la théorie des perturbations à N corps (Møller-Plesset du 2e ordre) sont disponibles dans VASP.

Dans VASP, les grandeurs centrales, comme les orbitales à un électron, la densité de charge électronique et le potentiel local sont exprimées dans des ensembles de bases d'ondes planes. Les interactions entre les électrons et les ions sont décrites à l'aide de pseudo potentiels conservant les normes ou ultra-doux, ou par la méthode des ondes augmentées par projecteur [19].

References:

- [1] E. Schrödinger, AnUndulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules, Phys. Rev. 28 (1926) 1049.
- [2] M. Born, R. Oppenheimer, Zur Quanten theorie der Molekeln, Ann. Physik 389 (1927) 457.
- [3] J.-L. Rivail, Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes, 2ième éd., CNRS, Edition (1999).
- [4] Lieb, Elliott H. (1983). "Density functionals for coulomb systems". *International Journal of Quantum Chemistry*. **24** (3): 243–277.
- [5] Khon, P. Hohenberg and and W., Phys. Rev. B 136, 867, (1964).
- [7] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics. Saunders College Publishing, Florida, 1976.
- [8] Morgan WS, Jorgensen JJ, Hess BC, Hart GLW (2018). Efficacité des grilles régulières généralisées de points k . Comp. Maître. Sci. 153 , 424-430. 10.1016/commatsci.2018.06.031
- [9] R. C. Longo, E. G. Noya, and al, Phys. Rev. B 72, 174409(2005).
- [10] Provincia, R. M. Dreizler and J. da, Density Functionl Methods in Physics.
- [11] D.M.Bird, J.A.White and, .Implementation of gradient-corrected exchange-correlations potentials in Car-Parrinello total-energycalculations.Pys, Rev. B. 50(70):4957,Aug1994.
- [12] C. Lee, W. Yang, and R.G. Parr, Developement of the Colle-Salvetti correlation-energy formula intoafunctional of the density, Phys. Rev. B37 (1988) 785.
- [13] Vela A, Pacheco-Kato JC, Gázquez JL, del Campo JM, Trickey SB.
- [14] P. Perdew, M. Ernzerhof, and K. Burke, J. Chem, Phys.105, (1996) 9982.
- [15] A. D. Becke, Int. J, Quantum. Chem, 23,1915 (1983).
- [16] A.M. Rappe, K.M. Rabe, E. Kaxiras, and J.D. Joannopoulos, Phys. Rev. B41, 1227(1990).
- [17] Razee SSA, Staunton JB, Pinski FJ (1999). Théorie des premiers principes de l'ansiotropie magnétocristalline des alliages désordonnés : application au cobalt platine. *Phys. Rév. B* 56 :8082 10.1103/PhysRevB.56.8082
- [18] Sholl DS, Steckel JA (2009). *Théorie fonctionnelle de la densité – une introduction pratique*. Hoboken, New Jersey : Wiley.

Chapitre II:

- [19] van Hove L. (1953). L'apparition de singularités dans la distribution élastique des fréquences d'un cristal . *Phys. Rév.*89 , 1189-1193 . 10.1103/PhysRev.89.1189 . 144 390 .

Chapitre III

Résultats et discussions

III-1 Détail de calcul :

Dans ce travail nous avons fait des calculs de type ab initio pour calculer les propriétés structurale, électronique, magnétique et mécanique des mono carbures des terres rares (CeC et NdC). Les calculs ont été effectués à l'aide du code VASP [1-3].

et en utilisant la méthode des ondes augmentées projetées (PAW) [4] et l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE) pour l'énergie d'échange et corrélation. La configuration électronique des états de valence sont présentés dans le tableau (III-1):

Atome	Configuration électronique
Ce	$4f^1 5d^1 6s^2$
Nd	$4f^4 6s^2$

Tab. III-1.configuration électronique du Ce et Nd

Nous avons examiné trois structures possibles : la structure NaCl-B1, la structure CsCl-B2 et la structure ZnS-B3(figure III.1):

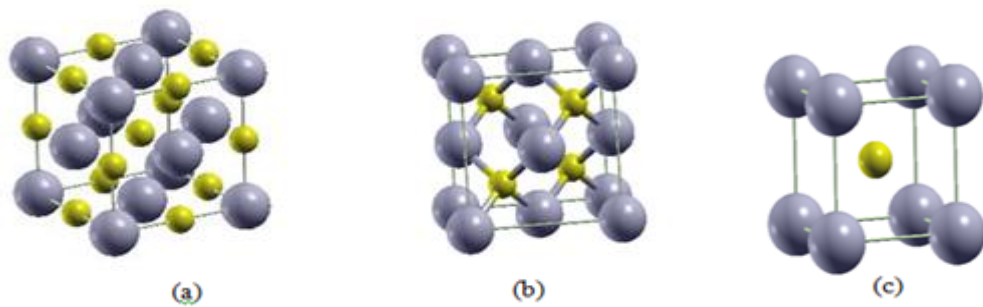


Fig.III.1. Structure cristalline du CeC et NdC en phase: (a) NaCl, (b) Zinc blende, (c) CsCl.

Chapitre III:

➤ Choix du nombre K-points :

Suivant la méthode de Monkhorst et Pack nous avons commencé par optimiser le nombre de points spéciaux « k » pour le maillage de la première zone de Brillouin, on a obtenu pour le CeC (13,13, 13) et pour NdC (13,13,13) . Les tableaux ci-dessous nous montrent la variance du K-points des deux carbures.

Tab III.2. Convergence de Kpt pour le carbure CeC

Nombre de KPTS	E _T
8	-14,5240
9	-14,5309
10	-14,5287
11	-14,5276
12	-14,5301
13	-14,5283
14	-14, 5283

Tab III.3. Convergence de Kpt pour le carbure NdC

Nombre de KPT	E _T
8	-15,0630
9	-15,0631
10	-15,0641
11	-15,0631
12	-15,0635
13	-15,0635

➤ choix de l'énergie de CUT-OFF :

L'énergie de CUT-OFF correspond à l'énergie cinétique des ondes. Nous avons fait varier cette énergie de 200 à 450 eV par un pas de 50 on a remarqué que $ENCUT_{CeC} = 550\text{eV}$, de même $ENCUT_{NdC} = 550\text{eV}$.

III-2. Propriétés structurales :

Dans cette partie nous déterminons les paramètres d'équilibre données à partir de la courbe E-V comme le paramètre de réseau (a), module de compressibilité (B), E_0 , en faisant varier l'énergie totale en fonction du volume pour les composés CeC et NdC. les valeurs (E-V) sont ajustées à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [5] :

$$E(V) = E_0 + B_0 V / B'_0 [((V_0 / V) B'_0 / B'_0 - 1) + 1] - B_0 V_0 / B'_0 - 1 \quad [1]$$

Les valeurs des paramètres de maille (a) et les modules de compression (B) ainsi que les énergies totales et les énergies de formation (E_{form}) sont regroupés dans le tableau (III.4).

III-4. Les valeurs des paramètres de maille a en angström (Å), les modules de compression (B), les énergies totales et les énergies de formation (E_{form}) en eV pour les carbures CeC et NdC respectivement.

Carbure Param.	A	B	E Tot	E form
CeC				
CsCl	3,099	124.8	-14,5292	-0,4563
NaCl	5,191	111.52	-15,2593	-1,1864
ZnS	5,493	87.68	-14,9380	-0,8651
NdC				
CsCl	3,121	128.32	-15,9526	-0,3782
NaCl	5,124	113.76	-16,3989	-0,8245
ZnS	5,451	89.6	-15,9136	-0,3392

L'enthalpie de formation d'un cristal E_{form} est la différence entre l'énergie du cristal et la somme des énergies des éléments dans leurs états standards.

Chapitre III:

Nous avons déterminé les énergies de formation (E_{form}) de ces composés, en utilisant l'équation suivante :

$$E_{\text{form}}(MC) = E_{\text{tot}}(MC) - [E_{\text{tot}}(M) + E_{\text{tot}}(C^g)] \quad (2)$$

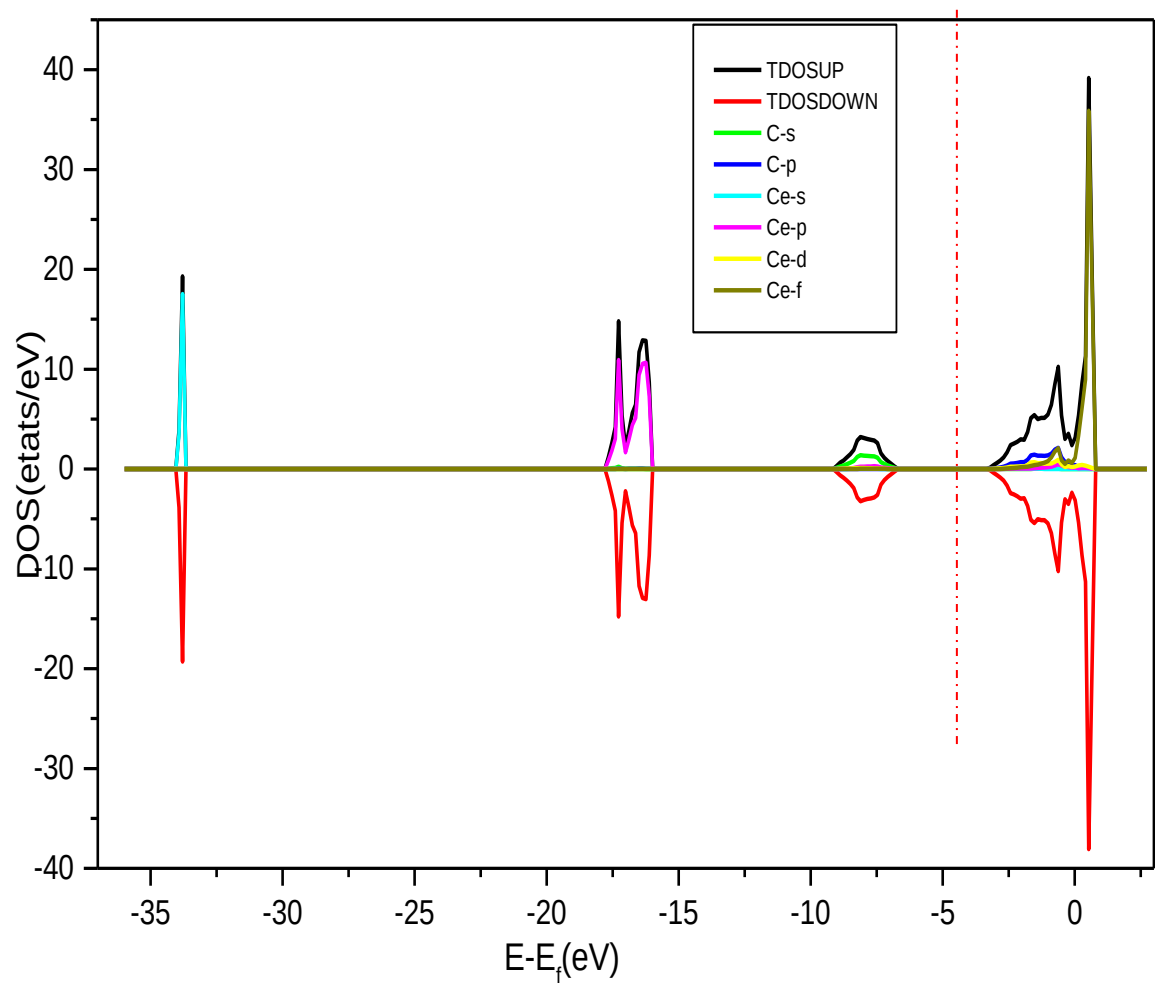
Où E_{tot} représente l'énergie totale de la maille unitaire. $E_{\text{tot}}(M)$ et $E_{\text{tot}}(C^g)$ sont les énergies par atome de M et de C dans la structure hexagonal et graphite, respectivement.

Nous pouvons constater que les énergies de formation des phases étudiées prennent des valeurs négatives, ceci signifie l'existence et la stabilité de ces composés. La structure la plus stable pour les deux matériaux est la structure NaCl.

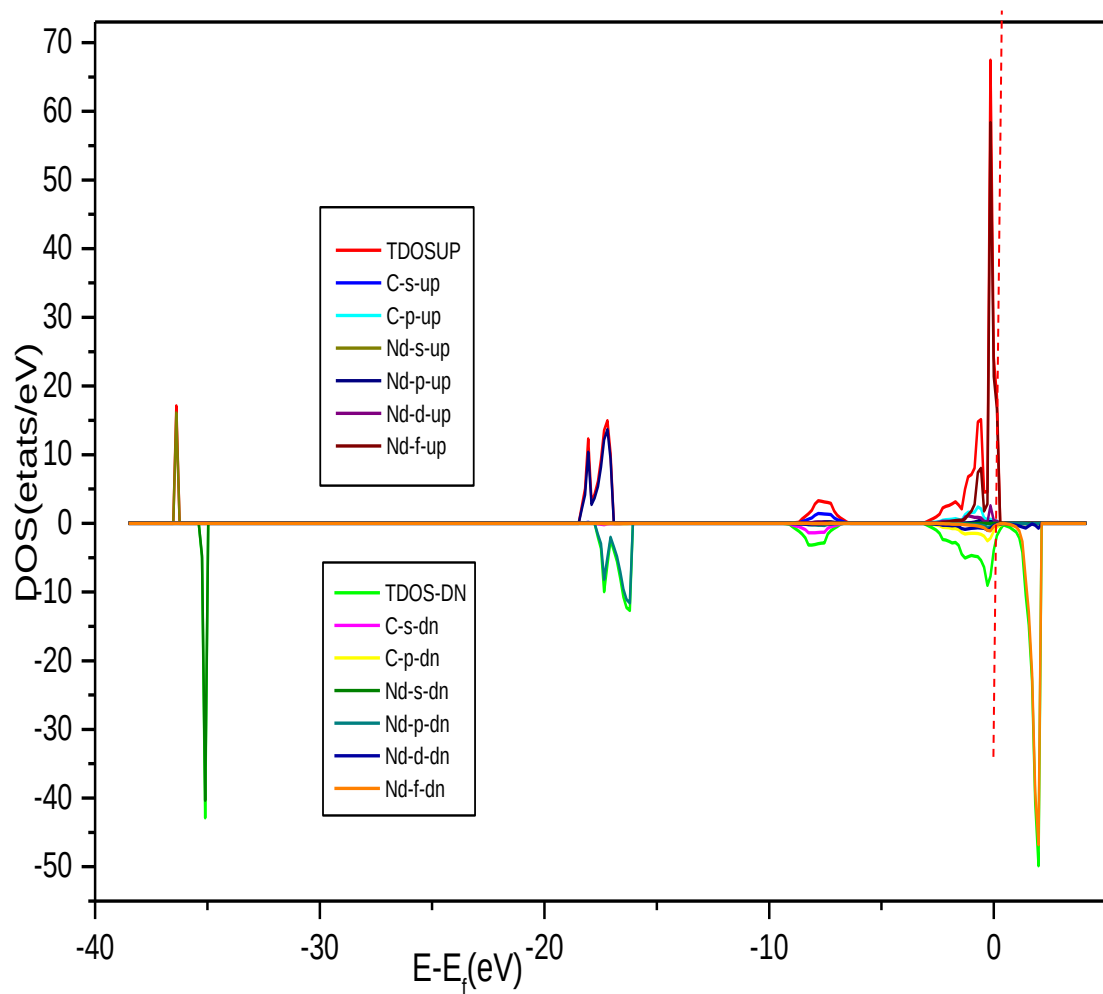
III-3. Propriétés électroniques :

Nous avons calculé les densités d'états (DOS) afin de comprendre la nature de liaison chimique entre les différents atomes Ce-C et Nd-C des mono carbures.

Les densités d'états (DOS) totales et partielles à spin up et spin down des deux carbures sont illustrées sur les figures (III.2) et (III.3), Le niveau de fermi est pris comme origine des énergies. Il est clair que ces matériaux ont un caractère métallique, expliqué par la continuité du DOS, au niveau de Fermi.



FigIII.2.DOS CeC dans la structure NaCl



FigIII.3.DOS NdC dans la structure NaCl

Les densités d'états présentent trois zones :

- Les états du cœur constitués principalement des états s et p du terre rare.
- Les états de valence proches du niveau de Fermi caractérisés par une hybridation des états $2p$ du carbone avec les états f du terre rare.
- Les états de conduction au-delà du niveau de Fermi constitués principalement des états f du terre rare.
- Nous pouvons remarquer qu'il y a une symétrie entre la densité d'états up et down pour le CeC c.à.d. la différence entre la valeur de la densité d'états des spins up et des spins down est nul, donc un moment magnétique nul.

Chapitre III:

- En revanche, la densité d'états électroniques du NdC est asymétrique (i.e. la différence entre les densités des états up et down n'est pas nulle). Le moment magnétique calculé est de $9.64\mu_B$. La majeure partie est concentrée sur les atomes de néodyme Nd. Le tableau (III.5) présente les valeurs des moments magnétiques total et sur les sites atomiques dans le composé NdC.

Tableau III.5.valeurs du moment magnétique total et sur les sites atomiques dans le composé NdC.

$M_{\text{total}} (\mu_B)$	9.64
$M_{\text{Nd}(1)} (\mu_B)$	2.635
$M_{\text{Nd}(2)} (\mu_B)$	2.635
$M_{\text{Nd}(3)} (\mu_B)$	2.635
$M_{\text{Nd}(4)} (\mu_B)$	2.635
$M_{\text{C}(1)} (\mu_B)$	-0.225
$M_{\text{C}(2)} (\mu_B)$	-0.225
$M_{\text{C}(3)} (\mu_B)$	-0.225
$M_{\text{C}(4)} (\mu_B)$	-0.225

III-4 : Propriétés mécaniques:

L'étude des propriétés mécaniques nous permet de vérifier la stabilité mécanique des composés CeC et NdC dans la structure NaCl. Les constantes élastiques jouent un rôle très important pour comprendre le comportement mécanique, ce dernier est caractérisé par les modules suivants :

***module de Young(E) :**

Le module de Young est la contrainte mécanique qui engendrerait un allongement de 100 % de la longueur initiale d'un matériau:

$$E = \frac{9BG}{(3B + G)}$$

***module de cisaillement (G):**

Il décrit le cisaillement élastique consécutif à l'application d'une sollicitation de cisaillement. Tenant compte des relations de symétrie, ce module est défini pour les systèmes cubiques, comme suis [6] :

$$G_c = \frac{1}{15}(3C_{11} - 3C_{12} + 9C_{44})$$

***coefficient de poisson :**

Il caractérise la contraction de la matière perpendiculaire à la direction de l'effort appliqué:

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$$

Le tableau (III.6) regroupe les constantes élastiques calculées pour les deux carbures. Toutefois, à notre connaissance, il n'y a pas de résultats expérimentaux ou théoriques concernant les propriétés élastiques de CeC et NdC.

La première remarque à faire est que l'ensemble des constantes élastiques C_{ij} pour CeC satisfassent les critères de stabilité de Born-Huang [7] ci-dessous pour un cristal cubique, ce qui indique une stabilité mécanique pour CeC, alors que NdC est mécaniquement instable : $(C_{11}-C_{12})>0$, $(C_{11}+2C_{12})>0$, $C_{44}>0$,.

Tableau III.6. Constantes élastiques C_{ij} , module de compression (B), module de cisaillement (G) et module de Young (E) en GPa et le coefficient de Poisson (ν) pour les carbures CeC et NdC respectivement.

Systems	CeC	NdC
C_{11}	155.96	94.65
C_{12}	99.95	114.42
C_{44}	59.77	32.15
B	118.62	107.83
G	47.06	15.33
G/B	0.39	0.14
E	41.56	14.63
N	0.39	0.54

Chapitre III:

Selon la théorie d'A. P. Gerk [8], plus la valeur de G est grande, plus le matériau est dur. On peut remarquer que CeC est plus dur que NdC.

Le rapport G/B peut être défini comme un critère pour la description du comportement fragile/ductile des matériaux. Un matériau est ductile si $G/B < 0.5$, autrement il devrait être fragile [9]. Dans notre cas, selon ce critère, les deux matériaux sont ductiles.

Ces résultats sont en accord avec les mesures de ductilité utilisant le coefficient de Poisson (ν). La valeur de ν est petite pour les matériaux covalents ($\nu \sim 0.1$), tandis que pour les matériaux métalliques ν est typiquement de l'ordre de 0.33 [48]. De ce fait, CeC et NdC ont un caractère plutôt métallique que covalent.

Références:

- [1] Kresse G, Hafner J, Phys. Rev. B, 49 (1994) 14251.
- [2] Kresse G, Furthmuller J, Comput.Mater.Sc, 6 (1996) 15.
- [3] <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>.
- [4] J. P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [5] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390.
- [6] W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik , Leipzig, Teubner (1928).
- [7] M. Born , K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon, Oxford (1956).
- [8] A. P. Gerk, J. Mater. Sci. 12 (1977) 735.
- [9] S.F. Pugh, Phil. Mag. 45 (1954) 823.

Conclusion

Dans cette étude nous avons étudié et prédire les propriétés structurales, électronique, mécaniques et magnétiques des mono carbures des terres rares qui se cristallisent dans les structures possibles CsCl, NaCl et ZnS.

Nous avons fait notre travail en utilisant une approche ab-initio appelée la méthode pseudo potentielle qui est efficace pour ce type de calcul. Cette méthode est développée dans le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de densité et implémenté dans le code VASP. Le potentiel d'échange et de corrélation est calculé par l'approximation de gradient généralisé GGA-PBE.

D'abord, nous avons commencé par l'étude des propriétés structurales telles que le paramètre de maille, l'énergie totale est l'énergie de formation. Les enthalpies de formation calculées sont négatives, ce qui signifie que tous nos composés sont stables, néanmoins la structure la plus stable est la structure NaCl.

Ensuite, nous avons calculé les propriétés électroniques. L'analyse de la densité d'état électronique a montré que ces matériaux ont un caractère métallique expliqué par la continuité du DOS au niveau de Fermi. Pour le CeC il y'a une symétrie entre la densité d'état up et down c'est-à-dire le moment magnétique est nul, tandis que la densité d'état up et down de NdC est asymétrique ce qui montre que ce matériau est magnétique.

Par la suite, nous avons étudié les propriétés mécaniques à partir des constantes élastiques. Nous avons constaté que le composé CeC présente une certaine stabilité mécanique alors que NdC est mécaniquement instable. En examinant le rapport B/G nous avons constaté que CeC et NdC sont des matériaux ductiles. le coefficient de poisson prouve que ces carbures présente un caractère métallique.

Bibliographie

Chapitre 1

- [1]Office parlementaire d'évaluation des choix scientifiques et technologiques. *Les enjeux des métaux stratégiques : Le cas des terres rares*. Compte rendu de l'audition publique du 8 mars 2011 et de la présentation des conclusions, le 21 juin 2011 par MM. Claude Birraux et Christian Kert, députés.
- [2]Terres rares : enjeux stratégiques pour le développement durable. Conférence donnée par Patrice Christmann, directeur adjoint à la Stratégie du BRGM, dans le cadre des Grands Séminaires de l'Observatoire Midi-Pyrénées du CNRS, le 17 septembre 2013.
- [3]F. Hulliger, in: K.A. Gscheidner Jr., L. Eyring (Eds.), *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, North-Holland, New York, 4, 1979, (Chapter 33).

Chapitre II

- [1] E. Schrödinger, AnUndulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules, *Phys. Rev.* 28 (1926) 1049.
- [2] M. Born, R. Oppenheimer, Zur Quanten theorie der Molekeln, *Ann. Physik* 389 (1927) 457.
- [3] J.-L. Rivail, *Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, 2ième éd., CNRS, Edition (1999).
- [4] Lieb, Elliott H. (1983). "Density functionals for coulomb systems". *International Journal of Quantum Chemistry*. **24** (3): 243–277.
- [5] Khon, P. Hohenberg and and W., *Phys. Rev. B* 136, 867, (1964).
- [6] Wisesa P., McGill K., Mueller T. (2016). Génération efficace de grilles Monkhorst-Pack généralisées grâce à l'utilisation de l'informatique . *Phys. Rév. B* 93 :155109 10.1103/PhysRevB.93.155109
- [7] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, Florida, 1976.
- [8] Morgan WS, Jorgensen JJ, Hess BC, Hart GLW (2018). Efficacité des grilles régulières généralisées de points k . *Comp. Maître. Sci.* 153 , 424-430. 10.1016/commatsci.2018.06.031

Bibliographie:

- [9] R. C. Longo, E. G. Noya, and al, Phys. Rev. B 72, 174409(2005).
- [10] Provincia, R. M. Dreizler and J. da, Density Functionl Methods in Physics.
- [11] D.M.Bird, J.A.White and, .Implementation of gradient-corrected exchange-correlations potentials in Car-Parrinello total-energycalculations.Pys, Rev. B. 50(70):4957,Aug1994.
- [12] C. Lee, W. Yang, and R.G. Parr, Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula intoafunctional of the density, Phys. Rev. B37 (1988) 785.
- [13] Vela A, Pacheco-Kato JC, Gázquez JL, del Campo JM, Trickey SB.
- [14] P. Perdew, M. Ernzerhof, and K. Burke, J. Chem, Phys.105, (1996) 9982.
- [15] A. D. Becke, Int. J, Quantum. Chem, 23,1915 (1983).
- [16] A.M. Rappe, K.M. Rabe, E. Kaxiras, and J.D. Joannopoulos, Phys. Rev. B41, 1227(1990).
- [17] Razee SSA, Staunton JB, Pinski FJ (1999). Théorie des premiers principes de l'ansiotropie magnétocristalline des alliages désordonnés : application au cobalt platine . *Phys. Rév. B* 56 :8082 10.1103/PhysRevB.56.8082
- [18] Sholl DS, Steckel JA (2009). *Théorie fonctionnelle de la densité – une introduction pratique* . Hoboken, New Jersey : Wiley.
- [19] van Hove L. (1953). L'apparition de singularités dans la distribution élastique des fréquences d'un cristal . *Phys. Rév.*89 , 1189-1193 . 10.1103/PhysRev.89.1189 . 144 390 .

Chapitre III

- [1] Kresse G, Hafner J, Phys. Rev. B, 49 (1994) 14251.
- [2] Kresse G, Furthmuller J, Comput.Mater.Sc, 6 (1996) 15.
- [3] <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>.
- [4] J. P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais,Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [5] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30 (1944) 5390.
- [6] W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik , Leipzig, Teubner (1928).
- [7] M. Born , K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon, Oxford (1956).
- [8] A. P. Gerk, J. Mater. Sci. 12 (1977) 735.

Bibliographie:

[9] S.F. Pugh, Phil. Mag. 45 (1954) 823.

Résumé:

Résumé

Les carbures des terres rares possèdent des propriétés physiques et mécaniques intéressantes qui leur permettent d'être des candidats potentiel pour de nombreuses applications, notamment dans l'industrie automobiles et aérospatiale ...

Dans notre travail, nous proposons d'étudier les propriétés structurales, électronique, mécanique et magnétique des mono carbures de terres rares de type CeC et NdC, en utilisant l'approche Ab-initio dans le cadre de la DFT.

Mots clés : mono carbures des terres rares, simulation Ab-initia, propriétés structurales, électronique, mécanique et magnétique.

ملخص

تتمتع الكربيدات الأرضية النادرة بخصائص فيزيائية وميكانيكية مثيرة للاهتمام، مما يسمح لها بأن تكون مرشحة محتملة للعديد من التطبيقات، خاصة في صناعات السيارات والفضاء... في عملنا، نقترح دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية والميكانيكية والمغناطيسية للكربيدات الأرضية النادرة من النوع CeC وNdC، باستخدام نهج Ab-initio في إطار DFT. الكلمات المفتاحية: الكربيدات الأحادية الأرضية النادرة، محاكاة البداية، الخواص التركيبية، الإلكترونيات، الميكانيكا والمغناطيسية.

Summary

Rare earth carbides have interesting physical and mechanical properties which allow them to be potential candidates for numerous applications, particularly in the automobile and aerospace industries...

In our work, we propose to study the structural, electronic, mechanical and magnetic properties of rare earth mono carbides of CeC and NdC type, using the Ab-initio approach within the framework of DFT.

Key words: rare earth mono carbides, Ab-initio simulation, structural properties, electronics, mechanics and magnetic.