الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

People's Democratic Republic Of Algeria

Ministry Of Higher Education AndScientific Research

Ferhat Abbas University Setif



Faculty Of Sciences

Physics Department

Master 2 Materials Physics

Theme :

Theoretical Study Of The Structural, Electronic, And Elastic Properties Of $M_2PO_3N(M = Ca, Sr, Ba)$ Compounds

THE STUDENT :FRAMER :

IZOUNTAR Douaa BOUCENNA Sarra

For The Jury

President : MAOUCHE Djamel	Setif 1 University Ferhat Abbas
Examiner : BENOUATAS Assia	Batna2UniversityMosta Ben boulaid
Examiner : BELABBAS Saliha	Setif 1 University Ferhat Abbas

2025-2026

ABSTRACT

This thesispresents a comprehensive*ab initio*studybased on Density Functional Theory (DFT) to investigate the structural, elastic, and electronicproperties of the ortho-oxonitridophosphate compounds M_2PO_3N (M = Ca, Sr,Ba) .which crystallize in the structure orthorhombic space groupPnma (n°62). The calculationswerecarried out using the Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP) software, employing the Generalized Gradient Approximation (GGA). The calculatedequilibriumlatticeparameters (a, b, andc) and unit-cell volumes show excellent and perfect agreement with the availableexperimental data, validating the accuracy of the chosencomputationalparameters .The elasticanalysisdemonstratesthat the nineindependentelastic constants(C_{ij}), aresuccessfullysatisfy the Born mechanicalstabilitycriteria, confirming the rigorousmechanicalstability of the orthorhombic phase for all threematerials and reflect the resistance to shear deformation, all investigated compounds exhibit a clearly ductile mechanical behavior.We also discussed the electronic properties : band structure, total and partial electronic density diagrams (TDOS and PDOS) as well as electronic distribution ,reveal that all three materials are wide, direct band-gap semiconductors or insulators.

RÉSUMÉ

Cette thèse présente une étude ab initio complète basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour étudier les propriétés structurelles, élastiques et électroniques des composés d'ortho-oxonitridophosphateM_2PO_3N (M = Ca, Sr,Ba) . qui cristallisent dans la structure orthorhombique du groupe spatial Pnma (n°62). Les calculs ont été effectués à l'aide du logiciel Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP), en utilisant l'approximation du gradient généralisé (GGA). Les paramètres du réseau d'équilibre calculés (a, b et c) et les volumes unitaires montrent un accord excellent et parfait avec les données expérimentales disponibles, validant la précision des paramètres de calcul choisis. L'analyse élastique démontre que les neuf constantes élastiques indépendantes (C_{ij}), satisfont avec succès les critères de stabilité mécanique de Born, confirmant la stabilité mécanique rigoureuse de la phase orthorhombique pour les trois matériaux et reflétant la résistance à la déformation par cisaillement, tous les composés étudiés présentent un comportement mécanique clairement ductile. Nous avons également discuté des propriétés électroniques : structure de bande, diagrammes de densité électronique totale et partielle (TDOS et PDOS) ainsi que la distribution électronique, ce qui révèle que ces trois matériaux sont des semi-conducteurs ou des isolants à large bande interdite directe.

ملخص

تقدم هذه الأطروحة دراسة شاملة من البداية تعتمد على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) للتحقيق في الخصائص البنيوية والمرنة والإلكترونية لمركبات أورثوأوكسونيتريدوفوسفاتM_2PO_3N (M = Ca, Sr,Ba). والتي تتبلور في بنية المجموعة الفراغية المعينية .(n ° 62) Pnmaتم إجراء الحسابات باستخدام برنامج Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP)، باستخدام تقريب التدرج المعمم .(GGA) تظهر معلمات شبكة التوازن المحسوبة (a ،b ,c) وأحجام الخلايا الوحدوية اتفاقًا ممتازًا ومثاليًا مع البيانات التجريبية المتاحة، مما يثبت دقة المعلمات الحسابية المختارة. يوضح التحليل المرن أن الثوابت المرنة المستقلة التسعة,(C_{ij})تلبي بنجاح معايير الاستقرار الميكانيكي لبورن، مما يؤكد الاستقرار الميكانيكي الصارم للمرحلة المعينية الشكل لجميع المواد الثلاث ويعكس مقاومة تشوه القص، وتظهر جميع المركبات التي تمت دراستها سلوكًا ميكانيكيًا مرنًا بشكل واضح. ناقشنا أيضًا الخصائص الإلكترونية: بنية النطاق، ومخططات الكثافة الإلكترونية الكلية والجزئية(TDOS) و (PDOS بالإضافة إلى التوزيع الإلكتروني، والتي تكشف أن المواد الثلاث عبارة عن أشباه موصلات أو عوازل ذات فجوة نطاق واسعة ومباشرة.

LIST OF CONTENTS

TABLE OF CONTENTS

Abstract

Résumé

ملخص

DEDICACE

THANK YOU

NOMENCLATURE

GENERAL INTRODUCTION ..... **Erreur ! Signet non défini.**

BIBLIOGRAPHIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**

Chapter I: .....

Literature Reviewon Oxynitride Phosphate Compounds M_2PO_3N .....

I. 1. Introduction to Oxynitrides ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 1.1 Historical Development of Oxynitrides ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 1.2 Definition of Oxynitrides ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 1.3 Properties of Oxynitrides ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 2. Family and Properties of Alkaline-Earth Phosphate Oxynitrides (M_2PO_3N) **Erreur ! Signet non défini.**

I. 3. Crystal Chemistry of $M2PO3N$ ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 3.1 Description of the crystal system ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 3.2 Coordination polyhedra and Comparison with $M2PO4$ ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I . 4. Synthesis of $M2PO3N$ (M = Ca, Sr,Ba) ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 5. Applications ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 5.1 Photocatalytic Oxynitrides ..... **Erreur ! Signet non défini.**

I. 5.2 Oxynitrides for LEDs ..... **Erreur ! Signet non défini.**

BIBLIOGRAPHIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**

Chapter II: .....

Density functional theory .....

(DFT) .....

II. 1. The Many-Body Problem ..... **Erreur ! Signet non défini.**

II. 1.1 The Schrödinger equation for a multi-particle system ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 1.2 The Born-Oppenheimer approximation (decoupling nuclear and electronic motion) ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 1.3 The Hartree ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 1.4 The Hartree-Fock approximation ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 2. Density Functional Theory (DFT) ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 2.2 The Kohn-Sham equations ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 3. Exchange-Correlation Functionals ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 3.1 Local Density Approximation (LDA) ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 3.2 Generalized Gradient Approximation (GGA): ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 4 Plane Wave and Pseudopotential Approaches ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 4.1 The pseudopotential method ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 4.2 Plane wave method (PW) ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 4.2.1 The Bloch theorem ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 4.2.2 Sampling of the Brillouin zone ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 5 Method of Calculation ..... **Erreur ! Signet non défini.**
II. 5.1 The CASTEP software ..... Erreur ! Signet non défini.
II. 5.2 Important parameters in CASTEP ..... Erreur ! Signet non défini.
BIBLIOGRAPHIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**
Chapter III: .....
Results And Discussion .....
III. 1. STRUCTURAL PROPERTIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**
III. 2. ELASTICS PROPERTIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**
III. 2. 1. Elastic Constants ..... Erreur ! Signet non défini.
III. 2. 2. Mechanical Stability ..... Erreur ! Signet non défini.
III . 2.3. The elasticity modulus ..... Erreur ! Signet non défini.
III. 2 .4. Elastic Anisotropy ..... Erreur ! Signet non défini.
III. 3. ELECTRONIC PROPERTIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**
III. 3.1. Electronic Band Structure ..... Erreur ! Signet non défini.
III. 3.2. Electronic Density Of States ..... Erreur ! Signet non défini.
BIBLIOGRAPHIES ..... **Erreur ! Signet non défini.**
GENERAL CONCLUSION ..... **Erreur ! Signet non défini.**