	REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE **MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE** **Université Djilali Liabès de Sidi Bel Abbès**

Fiche de Présentation
Thèse de Doctorat

Type de la PG **نوع ما بعد التدرج**	Doctorat en Sciences

اســـم و لقــب الطـــــالب	سلاماني أمال
Nom et Prénom de l'étudiant	SLAMANI Amel
e-mail de l'étudiant / **البريد الالكتروني للطـــالب**	amelslamani@yahoo.fr
Numéro de téléphone **de l'étudiant /رقم هاتــف الطـالب**	07-76-50-77-99

Spécialité / التـــخصص*	Physique
Option / الفـــرع*	Physique et chimie des matériaux
Intitulé de la thèse / mémoire **عنـــــوان الأطروحة / المذكـــــرة**	Contribution à l'étude des propriétés structurales et électroniques des alliages ternaires KS_xX_{1-x} (X= Se et Te), KSe_xTe_{1-x} et UFe_4P_{12} : Méthode FP-LMTO.
Nom et Prénom de l'encadreur **اســـم و لقــب المؤطـــــر**	Pr. Mohammed Ameri
Date de soutenance **تاريخ المناقشة**	27/04/2015
Les mots clés **الكلمات المفتاحية** **keys word**	**Les mots clés**: FP-LMTO, DFT, GGA, LDA, KS, KSe, KTe, Skutterudites, UFe_4P_{12}. **الكلمات المفتاحية** : نظرية الكثافة, تقريب الكثافة المحلية, تقريب الكثافة المعمم, ثابت الشبكة, البنية الالكترونية, الخواص المرنة و الحرارية. **Key words:** FP-LMTO, DFT, GGA, LDA, KS, KSe, KTe, Skutterudites, UFe_4P_{12}.

(*) Se conformer aux intitulés des spécialités et des options portées sur la dernière attestation d'inscription.

الملخص (بالعربية) :

قمنا بانجاز دراسة نظرية باستعمال طريقة FP-LMOT في ايطار نظرية الكثافة الدالية باستعمال تقريب الكثافة المحلية و تقريب الكثافة المعمم لدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية للمركبات الثنائية KS, KSe, KTe و الثلاثية KSe_xTe_{1-x} KS_xSe_{1-x}و KS_xTe_{1-x}لمعرفة معامل الشبكة معامل الانضغاط و مشتقه. بالنسبة للمركبات الثلاثية تم اعتماد قانون فيغادر لحساب انحراف معامل الشبكة و استعمال طريقة Zunger لحساب الخصائص الفيزيائية .
لتعيين الخواص البنيوية, المرنة, الحرارية و الالكترونية للمركب UFe_4P_{12} ثم حساب تبادل الكمون الترابط باستعمال تقريب الكثافة المحلية. الخواص البنيوية مثل مقادير ثابت الشبكة موافقة للقيم المتوفرة. النتائج التحصل عليها للبنية الالكترونية تبن ظهور شبه فجوة طاقوية فوق مستوى Fermi عند Γ. قمنا بحساب الخواص المرنة و الحرارية لهدا المركب و تأثير الحرارة و الضغط على الخواص الحرارية.

Résumé (Français et/ou Anglais) :

Résumé

Nous avons effectués une étude théorique en utilisant la méthode du potentiel total linéaire de orbitales muffin-tin (FP-LMTO), en premier lieu nous avons entrepris une étude des propriétés structurales et électroniques des alliages binaires KS, KSe et KTe et ternaires KS_xSe_{1-x}, KS_xTe_{1-x} et KSe_xTe_{1-x} en utilisant la GGA et la LDA dont le paramètre de maille, le module de compressibilité et gap d'énergie ont été investit, ainsi que La déviation des paramètres de maille et des modules de compressibilités en fonction de la concentration *x* par rapport de la loi de Vegard ont été observée pour les trois alliages, nous avons aussi calculé le bowing en fonction de la concentration *x*. Dans la seconde partie de notre travail nous avons étudiés les propriétés structurales, élastiques, thermodynamiques et électroniques du composé skutterudite UFe_4P_{12} basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dont le potentiel d'échange-corrélation est traité par l'approximation de la densité locale (LDA). Les propriétés structurales telles que le paramètre du réseau et les positions atomiques sont en bon accord avec les données disponibles. Les résultats obtenus des structures de bandes montrent l'apparition d'un pseudo gap au dessus du niveau de fermi au point Γ. Nous avons calculé aussi les propriétés élastiques et composés ainsi que l'effet de la température et de la pression sur les propriétés thermodynamiques.

Abstract

We have performed a theoretical study using the full-potential linear muffin–tin orbital approach (FP-LMTO) based on the density functional theory (DFT).The first part devoted to the study of the structural and electronic properties of the binary KS, KSe and KTe and theirs ternary alloys KS_xSe_{1-x}, KS_xTe_{1-x} and KSe_xTe_{1-x} using the GGA and LDA approximations. The lattice parameter, bulk modulus and band gap were investigated. Deviation of the lattice constants from Vegard low's and bulk modulus were observed for the three alloys. Using the approche of Zunger, the microscopic origins of band gap bowing have been detailed and explained. In the second part we have reported the structural, elastic, thermodynamic, and electronic properties of skutterudites compounds UFe_4P_{12}. The exchange-correlation potential is treated by the local density approximation (LDA). The calculated structural properties such as the equilibrium lattice parameter and atomic position are in good agreement with the available data. The obtained results for the band structure show tendency of forming gap pseudo-gap that appears above the Fermi level at Γ point The dependence of the energy band gaps. We have also calculated the elastic properties of this compounds as well as the affects of temperature and pressure on the thermodynamic properties.