these de doctorat

Nom : BOUZOUIRA
Prénom : Noureddine
Intitulé : Contribution à l'étude des propriétés structurales et électroniques des alliages $Si_xGe_{1-x}C$ et $Cu_xAg_{1-x}I$ par la méthode FP-LMTO
Spécialité : Physique
Option : Physique des matériaux magnétiques
e-mail : allianz25@yahoo.fr

Abstract

In this work, we have investigated the structural and electronic properties of the alloys semiconductors binaries: SiC,GeC,CuI, AgI ; ternaries: $Si_xGe_{1-x}C$, $Cu_xAg_{1-x}I$.These alloys have been calculated, using the full-potential linear muffin-tin-orbital (FP-LMTO) method based on density functional theory, within both the local density approximation and the generalized approximation (GGA). The equilibrium lattice constants and the bulk modulus are compared with previous theoretical calculations. The concentration dependence of the electronic band structure and the direct-indirect band gaps is also investigated. Using the approach of zunger and co-workers the microscopic origins of the gap bowing were also explained.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des composés binaires SiC, GeC, CuI, AgI et leur alliages semi conducteurs $Si_xGe_{1-x}C$, $Cu_xAg_{1-x}I$.ces alliages ont été calculés, en utilisant la méthode linéaire des orbitale muffin-tin (FP-LMTO) basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), dans l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA). Les paramètres de réseau a l'équilibre et le module de compressibilité sont comparés avec des calcules expérimentales et théoriques et sont ont très bonne concordances. Les structures des bandes électroniques et la dépendance de ses structures à la concentration. Sont également étudiées. En utilisant l'approche de Zunger pour expliquer l'origine du bowing optique.

ملخـــــص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية للسبائك الناقلة الثنائية SiC,GeC,CuI,AgI و الثلاثية. $Si_xGe_{1-x}C,Cu_xAg_{1-x}I$. بواسطة طريقة المدارات الخطية muffin-tin (FP-LMTO) و التي ترتكز على كثافة الدالية(DFT)في تقريب الكثافة المحلية (LDA)ومعممة تقريب التدرج المعمم(GGA) لحساب الخواص البنيوية (تابت الشبكة , وتابت الصلابة)والالكترونية (عصابات الطاقة) قيم ثابت الشبكة عند التوازن المتحصل عليها متوافقة مع النتائج العملية المتوفرة. ونتائجنا , للنطاق الممنوع المباشر وغير المباشر , بنيات عصابات الطاقة , والكتلة الفعالة للسبائك الناقلة الثنائية والثلاثية موافقة جدا للمعطيات التجريبية الموجودة وبعض الحسابات النظرية المتوفرة ’علاوة على ذلك , هناك تطابق مرضي بين نتائجنا المحصل عليها بالنسبة للخواص الالكترونية لهذه المركبات وبين المعطيات التجريبية والنظرية المتوفرة , مع اعتماد طريقة (Zunger) لتفسير أصل (bowing) البصري .