



RESUME DE THESE DE DOCTORAT

Nom & Prénom(s)	BADI FOUZIA
E-mail (obligatoire)	badi_fouzia@yahoo.fr
Spécialité	Electronique
Titre	ASPECTS THEORIQUES LIES AUX NANOSTRUCTURES. APPLICATION : LES SUPER-RESEAUX A BASE CuCl, CuBr et CuI
Date de soutenance	10/10/2013
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	SEKKAL NADIR Professeur

Résumé :

Les structurations de la matière à l'échelle nanométrique ont ouvert de larges champs d'étude. L'analyse des propriétés structurales des nanostructures, de leurs influences sur les propriétés électroniques représentent actuellement un défi de première importance. Pour accéder à ces informations, il est nécessaire de faire appel à un ensemble de techniques numériques souvent complexes dans leurs mises en œuvre.

Le présent travail de recherche a été réalisé au Laboratoire des matériaux appliqués (AML) de l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbés. Sa concerne l'étude théorique des propriétés structurales et électroniques des halogénures de cuivre CuCl, CuBr, et CuI par l'une des méthodes ab initio qui s'avère recommander pour le traitement précis des régions interstitielles. Notamment c'est la méthode FP LMTO dans le cadre de l'approximation des ondes planes linéaires (PLW), en traitant l'énergie d'échange et de corrélation par l'approximation de la densité locale (LDA) de Perdew et al. En outre on calculera éventuellement les mêmes propriétés physiques lorsqu'on change la géométrie en construisant des super-réseaux dans les directions de croissance (001) et (110) à partir de ces mêmes semi-conducteurs.

Mots clés :

CuCl, CuBr, CuI, super réseau, puits quantiques structure électronique, propriétés structurales.

ملخص

إن تحليل الخصائص التركيبية للبنية النانوية و تأثيرها على الخصائص الإلكترونية تمثل حاليا تحديا كبيرا في مجال البحث العلمي. والتي فتحت أبواب واسعة من الدراسة التي تتطلب استخدام مجموعة من التقنيات الرقمية غالبا ما تكون معقدة في تنفيذها.

تم تنفيذ هذا العمل على مستوى مخبر المواد التطبيقية (AML) بجامعة جيلالي ليايس بسيدي بلعباس. يتناول موضوع المذكورة دراسة نظرية للخصائص التركيبية و الإلكترونية لهاليدات النحاس: CuCl, CuBr, و CuI باستخدام أسلوب من أساليب المبدأ الأول والذي يستحب في دراسة المناطق البينية. إنها طريقة FP LMTO في إطار تقريبي للموجات الخطية الطائرة (PLW) وبالإضافة الى ذلك، حسبنا نفس الخصائص الفيزيائية للشبكات العظيمة المتكونة من: CuCl, CuBr و CuI في اتجاهات الزيادة (100) و (110).

كلمات مفتاحيه

CuCl, CuBr, CuI الشبكة العظيمة، البئر الكمي، البنية الإلكترونية، الخصائص التركيبية.