

Nom : MOKADEM

Prénom : AZZEDDINE

Intitulé du sujet: Modélisation numérique des propriétés structurales et électroniques des matériaux à base d'oxygène par la méthode FP-LAPW

Spécialité : Physique

Option : Science et Génie des Matériaux

Email : mokadem_az@hotmail.fr

RÉSUMÉ

Une méthode de calcul Ab-Initio a été utilisée pour étudier les propriétés structurales et électroniques des oxydes transparents conducteurs (TCO) ZnO, SnO₂ et In₂O₃, en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées potentiel (FP-LAPW). L'énergie de d'échange-corrélation est décrite dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) en utilisant le paramétrage de Perdew, Burke et Ernzerhof (PBE). D'après les résultats des propriétés électroniques, nous constatons que ces matériaux ont des bandes interdites directes. Les paramètres structuraux sont déterminés. Une cohérence a été montrée entre nos résultats et ceux d'autres calculs théoriques et d'autres données expérimentales.

ABSTRACT

Ab-Initio calculations have been used to investigate the structural and electronic properties of the conducting transparent oxides (TCO) (ZnO, SnO₂ and In₂O₃), using the full-potential linearized augmented plane waves (FP-LAPW) method. The exchange correlation energy is described in the generalized gradient approximation (GGA) using the Perdew, Burke and Ernzerhof parameterization (PBE). From the results of the electronic properties, we find that these materials have direct bandgaps. The structural parameters are determined. An agreement was found between our results and those of other theoretical calculations and the experimental data.

المخلص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية للأكاسيد الشفافة الناقلة TCO (ZnO, SnO₂, In₂O₃) وذلك باستخدام طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW) باستعمال فرضية تقريب الانحدار المعمم (GGA). استنادا إلى نتائج من الخصائص الإلكترونية، نجد أن هذه المواد لها فجوة الطاقة مباشرة. يتم تحديد المعلمات الهيكلية. وقد تبين التوافق بين نتائجنا وتلك الحسابات النظرية الأخرى والبيانات التجريبية الأخرى.