THESE DE DOCTORAT

Intitulé :

Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques des super-réseaux $(GaP)_n/(AlP)_n$ et $(BP)_n/(BAs)_n$ par la méthode du premier- principe (FP-LMTO).

Présentée par : *MERABET Mostefa*
E-mail : *merabetmostefa@yahoo.fr*

Spécialité : *PHYSIQUE*
Option : *Sciences des Nanomatériaux*

مختصر

بواسطة طريقة (FP-LMTO) والتي ترتكز على نظرية كثافة الدالة (DFT) قمنا بحساب الخواص البنيوية و الالكترونية و الضوئية للمواد ذات الشبكة الممتازة (الهياكل ذات الآبار الطاقوية المكممة) $(GaP)_n/(AlP)_n$ و $(BP)_n/(BAs)_n$ وللتكوينات الثلاثة (n = 1, 2 et 3) وقد استعملنا تقريب (LDA) كما قمنا بمناقشة و بمقارنة النتائج المحصل عليها مع النتائج التجريبية و النتائج النظرية الأخرى ومن بين النتائج المهمة التي تحصلنا عليها هي أن : طول الشبكة التناظرية $a_{2,2}$ أكبر مرتين من $a_{1,1}$ و $a_{3,3}$ ثلاث مرات أكبر من $a_{1,1}$ *في كلتا الشبكتين* ; الشبكة الممتازة GaP/AlP لها عصابة طاقوية مانعة غير مباشرة (gap indirect) في التكوينيتين (n = 1 et 2) و عصابة طاقوية مانعة مباشرة (gap direct) في التكوينة (n = 3) أما في ما يخص الشبكة الممتازة $(BP)_n/(BAs)_n$ فلها عصابة طاقوية مانعة غير مباشرة في التكوينات الثلاثة.

وتجدر الإشارة إلى أن العصابة الطاقوية المانعة المباشرة في التكوينة $(BP)_3/(BAs)_3$ لها أهمية كبيرة لعمليات الانتقال الضوئية ويمكن أن تكون مفيدة لتصميم الليزر ذو الآبار الطاقوية المكممة.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés : structurales, électroniques et optiques des super-réseaux $(\boldsymbol{GaP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{AlP})_{\boldsymbol{n}}$ et $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{n}}$ pour les trois configurations (n = 1, 2 et 3) dans la phase zinc-blende, en utilisant la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui est l'une des méthodes *ab-initio*. Parmi les principaux résultats trouvés, nous avons le paramètre $a_{2,2}$ qui est deux fois plus grand que $a_{1,1}$ et $a_{3,3}$ trois fois plus grand que $a_{1,1}$ pour les deux super-réseaux. La nature indirecte de gap pour seulement $n = 1\ et\ 2$ et le comportement du gap direct quand $n = 3$ pour $(\boldsymbol{GaP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{AlP})_{\boldsymbol{n}}$. Le comportement d'un gap indirect au point (Γ-Δ_{min}) situé le long de la direction Γ-X pour les trois configurations pour le $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{n}}$. On peut souligner que le caractère du gap direct du super-réseau $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{3}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{3}}$ a une grande importance pour les transitions optiques et pourrait être utile pour la conception des lasers à puits quantique.

Abstract

An accurate *ab initio* full-potential linear muffin-tin orbital method has been used to investigate the structural, electronic and optical properties of $(\boldsymbol{GaP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{AlP})_{\boldsymbol{n}}$ and $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{n}}$ superlattices (SLs) for the three configurations (n = 1, 2 and 3) in zinc-blende phase. The exchange-correlation potential is treated with the local density approximation (LDA). Among the main results found: that the parameter $a_{2,2}$ is twice larger than $a_{1,1}$, and $a_{3,3}$ three times greater than $a_{1,1}$ for the two superlattices; the nature of indirect gap to just for $n = 1\ et\ 2$ and direct gap behavior when *n = 3* for $(\boldsymbol{GaP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{AlP})_{\boldsymbol{n}}$ superlattice; the behavior of an indirect gap at point (Γ-Δ_{min}) located along Γ-X direction for the three configurations for $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{n}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{n}}$ superlattice. It may be noted that the character of the band gap of the $(\boldsymbol{BP})_{\boldsymbol{3}}/(\boldsymbol{BAs})_{\boldsymbol{3}}$ superlattice is of great importance for optical transitions and could be useful for the design of quantum well lasers.