

Nom : BOUDIA

Prenom :Ketouma

Courriel :bouetoil@yayoo.fr

Intitulé : Contribution à l'étude des propriétés physiques des alliages $In_{1-x}Al_xBi$, $M_xCa_{1-x}S$ ($M=Sr$ et Ba), $Ba_xSr_{1-x}S$ et $CeOs_4Sb_{12}$ par la méthode ab initio FP-LMTO.

Résumé

Le sujet de la thèse concerne l'étude des propriétés structurales et électroniques de Chalcogénure Alcalino-terreux et les propriétés structurales électroniques élastiques et thermodynamiques des skutterudites en utilisant la méthode Full Potentiel linear muffin-tin orbital (FP-LMTO). Cette étude s'appuiera sur de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et de corrélation est décrite dans l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisée (GGA) en utilisant les paramètres de perdew. Ces matériaux ont révélé récemment beaucoup d'intérêt dans la communauté des sciences des matériaux. Les paramètres structuraux sont déterminés. D'après les résultats des propriétés électroniques, nous constatons que Chalcogénure Alcalino-terreux ont un large gap mais les skutterudites ont un étroit gap, ainsi nous avons expliqué et bien détaillé les paramètres de courbures, la masse effective, la capacité calorifique et le coefficient de dilatation thermique. Une cohérence a été montrée entre nos résultats et ceux d'autres calculs théoriques et d'autres données expérimentales.

Les mots clé: SrS; BaS; CaS; Semi-conducteur; FP-LMTO; Alliage; paramètre de courbure propriétés élastiques ; propriétés Electroniques ; Debye température, $CeOs_4Sb_{12}$

موضوع الأطروحة يتعلق بدراسة الخصائص البنيوية والالكترونية للكوجينات القلويات الترابية والخصائص البنيوية الالكترونية خصائص المرونة و الخصائص الترمو حرارية skutterudites باستعمال طريقة (FP-LMTO). هذه الدراسة تركز على نظرية DFT. استعملنا تقريب كثافة الموضع (LDA) و تقريب التدرج المعمم (GGA) قصد حساب كمون التبادل و الارتباط. أظهرت هذه المواد مؤخره اهتماما كبيرا في الأوساط العلمية. حساب العناصر كان اعتماد على المعايير البنيوية. وفقا لنتائج الخصائص الالكترونية نجد للكوجينات القلويات الترابية لها فجوة نطاق واسعة أما skutterudites فلها فجوة نطاق ضيقة, كما أننا شرحنا بالتفصيل عوامل الانحناء, الكتلة الفعلية, السعة الحرارية ومعامل التمدد الحراري. لوحظ الاتساق بين نتائجنا و حسابات نظرية و غيرها من الحسابات التجريبية الأخرى.

الكلمات المفتاحية : SrS; BaS; CaS, خليط, عامل الانحناء; خصائص المرونة; الخصائص الالكترونية; درجة حرارة دبي, $CeOs_4Sb_{12}$.

The subject of the thesis concerns the study of the structural and electronic properties of Chalcogenides Alkaline earth and structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of skutterudites using the method Full potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO). This study will build on the theory of density functional (DFT). The energy exchange and correlation is described in the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) using Perdew settings. These materials have recently shown great interest in the materials science community. The structural parameters are determined. According to the results of the electronic properties, we find that Chalcogenides Alkaline earth have a wide gap but skutterudites have a narrow gap, so we explained and detailed settings curvatures, the effective mass, heat capacity and coefficient of thermal expansion. Consistency was observed between our results and those of other theoretical calculations and other experimental data.

Keywords : SrS; BaS; CaS; Semiconductors; FP-LMTO; Alloys; Bowing Parameter; Elastic properties; Electronic properties; Debye temperature, $CeOs_4Sb_{12}$.