

Nom :Dahmane

Prénom : fethallah

Spécialisé : physique.

Option :physique des matériaux

E_mail : fethallah05@gmail.com

Résumé :

Dans ce travail ,on présente une étude théorique des propriétés structurales ,électroniques ,magnétiques et optiques pour la structure zincblende : $Ga_{1-x}T M_xN$, $Al_{1-x}T M_xN$ et $In_{1-x}T M_xN$ ($TM=Cr, Fe, Mn, V$)avec la méthode onde plane augmenté linéarisé avec approximation LSDA(approximation de la densité locale). On a analysé la dépendance du paramètre structural avec la concentration x avec $x =0.125, x=0.25, x=0.50, x=0.75$,on a trouvé une déviation par rapport à la loi de Vegard . Nos calculs vérifient aussi le caractère demi-métallique du composé GaN, AlN et InN dopé avec les métaux de transitions .le rôle de l'hybridation p-d et aussi analysé par la DOS totale(TDOS) et la DOS partielle (PDOS). Le moment magnétique de $Ga_{1-x}T M_xN$, $Al_{1-x}T M_xN$ et $In_{1-x}T M_xN$ a été étudié avec l'augmentation de la concentration de TM. L'atome TM est la source la plus importante dans le moment magnétique total de ces composés, cependant la contribution des atomes Ga (Al, In) et N est mineur. Les propriétés optiques peuvent être décrites par la fonction diélectrique complexe $\epsilon^2(\omega)$,La connaissance des deux parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique permet le calcul de déférentes constantes optiques, tels que R la réflectivité spectrale (ω), l'indice de réfraction $n(\omega)$.

Abstract:

In this work, we present a theoretical study of structural, electronic, magnetic and optical properties for zincblende: $Ga_{1-x}T M_xN$, $Al_{1-x}T M_xN$ and $In_{1-x}T M_xN$ ($TM=Cr, Fe, Mn, V$) using the full-potential augmented plane wave (FP-APW) method with local spin density approximation (LSDA). We have analysed the dependence of structural parameters values on the composition x in the range of $x=0.125, x=0.25, x=0.50, x=0.75$, we found existence of deviation from Vegard's law. Our calculations also verify the half-metallic ferromagnetic character of TM doped GaN, AlN and InN. Also, the role of p-d hybridization is analyzed by partial (PDOS) and total density of stat (TDOS). The magnetic moment of $Ga_{1-x}T M_xN$, $Al_{1-x}T M_xN$ and $In_{1-x}T M_xN$ has been studied by increasing the concentration of TM atom. The TM atom is the most important source of the total magnetic moment in these alloys, while the contributions from Ga(Al,In) and N are minor. The optical properties can be described by the complex dielectric function $\epsilon^2(\omega)$,The knowledge of both real and imaginary parts of the dielectric function allows the calculation of various optical constants, such as the spectral reflectivity $R(\omega)$, the refractive index $n(\omega)$.

ملخص

نقدم في هذه الرسالة حساب الخصائص البنيوية، الإلكترونية، المغناطيسية و الضوئية للمخاليط المغناطيسية $Ga_{1-x}TM_xN$, $Al_{1-x}TM_xN$, $In_{1-x}TM_xN$ ($TM= Cr, Mn, V, Fe$) مع $x = 0.125, x=0.25, x=0.50, x= 0.75$) في حالة التركيب zincblende و ذلك باستعمال طريقة الموجات المستوية المعدلة الخطية باستخدام تقريب الكثافة المغزلية الموضوعية LSDA. باستخدام البرنامج Wien2k. درسنا تأثير تركيز TM على الخصائص البنيوية وجدنا انحراف النتائج عن قانون فيقار. كما قمنا بدراسة الخصائص شبه المعدنية للمخاليط المذكورة أعلاه. وقمنا بدراسة العزوم المغناطيسية للمركبات ووجدنا أن أهم مصدر العزوم المغناطيسية يأتي من المواد TM في حين أن العزوم الأخرى ضعيفة. وقمنا بدراسة الخصائص الضوئية باستخدام الدالة ϵ ، معرفة الجزء الحقيقي و لتخيلي ل ϵ يمكن من قياس الخصائص الضوئية الأخرى.