

Non: FODIL

prénom: Meriem

date de naissance :07/08/1988

lieu de naissance :Ain témouchent

numéro de téléphone :0551-28-80-79

email:maroco_mr@hotmail.fr

spécialité: physique

Option : modélisation et simulation numérique

Thème de Doctorat :

Contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques des binaires TiN, AlN, CdSe , ZnSe et leurs alliages :Méthodes de premier principe

Résumé :

La recherche objet de ce mémoire est d'étudier les propriétés de deux binaires distincts par deux méthodes différentes FP-LMTO_FP-LAPW, qui possèdent une base unique et commune de théorie dénommée DFT (la théorie de la fonctionnelle de la densité). utilisant la méthode FP-LAPW pour détecter les propriétés structurales et élastiques des binaires AlN et TiN ,Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA) ,les propriétés structurales telles que le paramètre de réseau ,le module compressibilité et leur premier dérivé sont calculés et pour les propriétés élastique nous avons décompté uniquement les constantes élastiques. La deuxième méthode FP-LMTO concerne les propriétés structurales ,électroniques des binaires CdSe et ZnSe et leur alliage .pour cela nous avons employé l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) .En déterminant l'effet de la composition sur les propriétés structurales telles que le paramètre d'équilibre, le module de compressibilité et les énergies des structures de bande .nous rapportons les résultats concernant la variation des structures de la bande directe et indirecte aussi que le paramètre de courbure (bowing) .en utilisant l'approche de Zunger et ces collègues, les origines microscopiques de la structure de bande du paramètre de courbure ont été détaillées et expliquées. Un accord raisonnable est trouvé entre nos résultats et d'autres calculs théoriques de comparaison.

Mot clés : FP-LMTO, FP-LAPW, alliage

Abstract

The aim of this work is to study the properties of two distinct binary by two different methods FP-LMTO_ FP-LAPW who have a single and common theory called DFT(density –functional theory) the FP-LAPW method using to detect structural and elastic properties of binary AlN and TiN.the exchange –correlation potential is treated by the generalized gradient approximation (GGA).structural parameters ,including lattice constant , bulk modulus and its pressure parameters and of the élastic properties we counted only the elastic constants.the second method FP-LMTO concerns structural and electronic properties of CdSe , ZnSe and their alloy .For this we used the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) .We have investigeted the effect of composition on structural properties such as lattice constants ,bulk modulus and band gap .we report the results concerning the variation of the gaps and crossorver of the direct ,indirect band gap and the bowing .Using the approach of Zunger and coworkers the microscopic origins of band band gap bowing have been detailed and explained . A reasonable agreement is found between our results and other theoretical calculations for comparison.

Keywords : FP-LMTO, FP-LAPW, alloy

المخلص

الهدف من هذا العمل هو دراسة خصائص اثنين من الثنائية المتميزة من قبل طريقتين مختلفتين FP-LMTO FP-LAPW , اللتان يعتمدان على نظرية واحدة و مشتركة تسمى DFT تم استخدام طريقة FP-LAPW لدراسة الخصائص البنيوية و الميكانيكية مثل ثابت الشبكة معامل الانضغاط و مشتقته الاولى ثابت المرونة للثنائية TiN,AlN . بالنسبة للطريقة الثانية FP-LMTO تتعلق بالخصائص البنيوية و الالكترونية ل CdSe,ZnSe و خلاصتهم , بغية حساب كمون التبادل و الارتباط استعمالنا تقريب كثافة الموضع LDA و تقريب التدرج المعمم GGA لقد درسنا الخصائص البنيوية مثل عناصر التوازن كذلك حساب عامل الانضغاطية و طاقات الفرق في البنية .اعطينا نتائج الاختلاف في الفرق في البنية المباشرة و غير المباشرة و ايضا عامل الانحناء باستعمال مقاربة Zunger و زملائه .المبادئ المجهرية لبنية معامل الانحناء شرحت بطريقة مفصلة , تم العثور على اتفاق معقول بين نتائجنا والحسابات النظرية الأخرى

كلمات افتتاحية : خليط , FP-LMTO, FP-LAPW