

KHATIR RADJA

khatir_rajaa@hotmail.fr

Calcul ab-initio des propriétés structurales et électroniques des composés semi-conducteurs intermétalliques à base de Galium

Résumé

Cette thèse se concentre sur les calculs ab-initio des propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs intermétalliques le RuGa_3 , l' OsGa_3 et le RuGa_2 . Nos calculs sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW). On a effectué les calculs en utilisant les approximations du potentiel d'échange et de corrélation en l'occurrence LDA et GGA et leurs améliorations la GGA-mBJ et LDA-mBJ. Dans ce travail, nous avons fait l'étude des propriétés du RuGa_3 et OsGa_3 en utilisant deux type de structure la FeGa_3 et la CoGa_3 d'où la centrosymétrie des atomes est la raison de leurs différence.

Abstract

This thesis focuses on the ab-initio calculations of structural, electronic and optical properties of the intermetallic semiconductor RuGa_3 the OsGa_3 and RuGa_2 . Our calculations are based on the theory of density functional method using the augmented plane wave and linearized (FP-LAPW). Calculations were performed using approximations on the exchange and correlation potential in LDA and GGA case and improvements GGA-mBJ and LDA-mBJ. In this work, we make the study of properties and RuGa_3 and OsGa_3 using two type of structure: the FeGa_3 and CoGa_3 the reason for their difference is centrocymitricité of the atoms .

ملخص:

ركزنا عملنا في هذه الأطروحة في دراسة الخواص الهيكلية، الالكترونية و البصرية للسبائك نصف الناقلية " RuGa_3 , OsGa_3 , RuGa_2 "، حساباتنا تعتمد على المحاكاة و استنادا على طريقة *ab initio* و على أساس DFT استعمالنا طريقة الموجات الخطية المرتفعة (FP-LAPW). لقد قمنا بالحسابات باستعمال تقريبات لفرق كمون التبادل و الترابط و ذلك عن طريق LDA, GGA و تحسيناتها GGA-mBJ و LDA-mBJ. من خلال هذه الأطروحة، لقد تعرضنا إلى دراسة خواص « RuGa_3 et OsGa_3 » باستعمال نوعين من الهياكل « FeGa_3 et CoGa_3 » و من تم استنتجنا أن التناظر المركزي للذرة هو السبب في اختلافهم.