

**UNIVERSITE DJILLALI LIABES  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
SIDI BEL ABBES**

# ***Thèse de Doctorat***

**Nom et prénom : GUEMOU M'hamed**

*Spécialité: Physique*

*Option: Sciences des Matériaux*

*Intitulé :*

**Modélisation théorique et simulation numérique de l'effet du désordre dans les systèmes ternaires à base de bore partiellement miscibles**

*Soutenu le 14 Mars 2013*

**Année universitaire 2012-2013**

**Résumé :** Les borures attirent l'intention de plusieurs laboratoires et équipes de recherches ces dernières années dans le monde. Nous avons voulu par ce modeste travail explorer quelques propriétés importantes de cette classe des matériaux et particulièrement  $B_xGa_{1-x}As$  et  $BN_xAs_{1-x}$ .

Dans le cadre de la fonctionnelle de densité (DFT) nous avons mené notre travail en utilisant la méthode des ondes planes augmentées avec un potentiel total (FP-LAPW) et dans le but d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques de  $B_xGa_{1-x}As$  et  $BN_xAs_{1-x}$ . Nos résultats de calculs sont en bon accord avec d'autres travaux théoriques et les données expérimentales disponibles et montrent que ces derniers possèdent des propriétés électroniques et optiques importantes pour différentes applications optoélectroniques.

**Mots clés :** *FP-LAPW, DFT, Wien2k, Borures, GaAs, BAs, BN,  $B_xGa_{1-x}As$ ,  $BN_xAs_{1-x}$*

**Abstract:** in recent years, boron compounds attract several laboratories and research teams in the world. We wanted by this modest work exploring some important properties of this class of materials, particularly  $B_xGa_{1-x}As$  and  $BN_xAs_{1-x}$ .

In this work, we present a density-functional theory study of structural, electronic and optical properties of Bas, GaAs and BN compounds and their ternary  $B_xGa_{1-x}As$  and  $BN_xAs_{1-x}$  alloys, using the all-electron full potential linear augmented plane-wave method (FP-LAPW) as employed in WIEN2k code. The results obtained for structural, electronic and optical properties compared with experimental and other computational data, results are in good agreement and show that they have electronic and optical properties important for various optoelectronic applications.

**Keywords:** *FP-LAPW, DFT, Wien2k, Boron compound, GaAs, BAs, BN,  $B_xGa_{1-x}As$ ,  $BN_xAs_{1-x}$*

**ملخص:** المواد البوريرية شغلت اهتمام عدة فرق ومخابر بحث عبر العالم في السنوات الأخيرة. أردنا بهذا العمل

المتواضع استكشاف بعض الخصائص الهامة لهذه الفئة من المواد وخاصة  $B_xGa_{1-x}As$  و  $BN_xAs_{1-x}$ . في إطار نظرية DFT أجرينا عملنا و باستخدام FP-LAPW بهدف دراسة الخصائص البنوية، الكهربائية والضوئية لـ  $B_xGa_{1-x}As$  و  $BN_xAs_{1-x}$ .

النتائج التي تحصلنا عليها توافقت جيدا غيرها من النتائج النظرية والتجريبية المتوفرة حيث ظهر أن هذين المركبين لديهم خصائص الكترونية و بصرية هامة تؤهلها لتطبيقات عملية متعددة.

الكلمات المفتاحية :

*FP-LAPW, DFT, Wien2k, البوريرات, GaAs, BAs, BN,  $B_xGa_{1-x}As$ ,  $BN_xAs_{1-x}$*

## Résumé

Les borures attirent l'intention de plusieurs laboratoires et équipes de recherches ces dernières années dans le monde. Nous avons voulu par ce modeste travail explorer quelques propriétés importantes de cette classe des matériaux et particulièrement  $B_xGa_{1-x}As$  et  $BN_xAs_{1-x}$ .

Dans le cadre de la fonctionnelle de densité (DFT) nous avons mené notre travail en utilisant la méthode des ondes planes augmentées avec un potentiel total (FP-LAPW) et dans le but d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques de  $B_xGa_{1-x}As$  et  $BN_xAs_{1-x}$ . Nos résultats de calculs sont en bon accord avec d'autres travaux théoriques et les données expérimentales disponibles et montrent que ces derniers possèdent des propriétés électroniques et optiques importantes pour différentes applications optoélectroniques.

**Mots clés :** *FP-LAPW, DFT, Wien2k, Borures, GaAs, BAs, BN,  $B_xGa_{1-x}As$ ,  $BN_xAs_{1-x}$*

## Abstract

In recent years, boron compounds attract several laboratories and research teams in the world. We wanted by this modest work exploring some important properties of this class of materials, particularly  $B_xGa_{1-x}As$  and  $BN_xAs_{1-x}$ .

In this work, we present a density-functional theory study of structural, electronic and optical properties of Bas, GaAs and BN compounds and their ternary  $B_xGa_{1-x}As$  and  $BN_xAs_{1-x}$  alloys, using the all-electron full potential linear augmented plane-wave method (FP-LAPW) as employed in WIEN2k code. The results obtained for structural, electronic and optical properties compared with experimental and other computational data, results are in good agreement and show that they have electronic and optical properties important for various optoelectronic applications.

**Keywords:** *FP-LAPW, DFT, Wien2k, Boron compound, GaAs, BAs, BN,  $B_xGa_{1-x}As$ ,  $BN_xAs_{1-x}$*

## ملخص

المواد البوريرية شغلت اهتمام عدة فرق ومخابر بحث عبر العالم في السنوات الأخيرة. أردنا بهذا العمل المتواضع

استكشاف بعض الخصائص الهامة لهذه الفئة من المواد وخاصة  $BN_x As_{1-x}$  و  $B_x Ga_{1-x} As$ .

في إطار نظرية DFT أجرينا عملنا و باستخدام FP-LAPW بهدف دراسة الخصائص البنيوية، الكهربائية والضوئية لـ

$BN_x As_{1-x}$  و  $B_x Ga_{1-x} As$ .

النتائج التي تحصلنا عليها توافقت جيدا غيرها من النتائج النظرية والتجريبية المتوفرة حيث ظهر أن هذين المركبين لديهم

خصائص إلكترونية و بصرية هامة تؤهلها لتطبيقات عملية متعددة.

**الكلمات المفتاحية :**

*FP-LAPW, DFT, Wien2k, البوريرات, GaAs, BAs, BN,  $B_x Ga_{1-x} As$ ,  $BN_x As_{1-x}$*