

Résumé :

Les spinelles sont des minéraux accessoires, de formule générale AB_2O_4 . Selon la répartition des cations A et B entre les sites, nous distinguons trois groupes de spinelles (normaux, inverses et intermédiaires). Le Zinc aluminate $ZnAl_2O_4$ est un matériau faisant partie de la famille des spinelles. Il est utilisé dans plusieurs applications potentielles ont été identifiées dans les secteurs industriels suivantes : réservoirs à essence, panneaux intérieurs et extérieurs, profilés, circuits imprimés, composants électriques, contenants et films...). A cause de cette importance industrielle et technologique plusieurs études effectuées sur ce matériau avec de nombreuses méthodes.

Parmi ces méthodes les plus performantes élaborées dans les approches du premier principe, citons celle des ondes planes augmentées linéarités à potentiel général. Cette dernière est implantée dans le code WIEN disponible au niveau local et qu'on a utilisé. Dans ce code il est fait appel à la théorie de la densité fonctionnelle où parmi les diverses approximations usuelles, celle de la densité locale de spin est disponible.

Ce travail de thèse étudie en détails la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et de la méthode des ondes planes augmentées linéarités (LAPW), rubriques largement exploitées dans le code WIEN, en vue de l'utilisation de celles-ci pour l'obtention des différentes propriétés du composé $ZnAl_2O_4$.

Dans le quatrième chapitre nous allons utiliser l'outil de la caractérisation optique pour pousser d'avantage notre investigation afin de déterminer de nouveaux paramètres de notre matériau. En effet Les méthodes optiques permettent de caractériser un bon nombre de paramètres tels que l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction et le coefficient d'absorption etc. ...

Finalemnt, le chapitre 5 de ce travail de thèse calcul et analyse les différents caractéristiques structurales, électroniques et optiques du spinelle ($ZnAl_2O_4$) par la méthode ab-initio.

Dans ce chapitre Nous examinons la structure électronique de ce composé. La bande calculée en utilisant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) est de 4,19 eV . Indique que ce composé est un candidat pour agir comme conducteur transparent matériaux d'accueil.

Cette structure à large bande interdite est utile dans le domaine photoélectronique et les applications optiques. Il est étudié en tant que matériaux candidats pour des revêtements optiques réfléchissants dans les applications aérospatiales. En raison de leur largeur de bande interdite, il est suscité beaucoup d'intérêt que possible transparentes conductrices d'oxyde (TCO) des matériaux.

Résumé :
