

Thèse de Doctorat

Nom : BENTOUAF
Prénom : Ali
Intitulé : Contribution à l'étude par la méthode du premier principe des propriétés physiques de l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{P}$.
Spécialité : Physique
Option : Science des matériaux
e-mail : lilo.btf@gmail.com

Résumé

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés structurales, électroniques, optiques thermodynamiques des binaires AlP et InP et leur alliage. Pour ceci, nous avons utilisé la méthode FP-LMTO (Full Potentiel linear muffin-tin orbital) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et de corrélation est décrite dans l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisée (GGA) en employant la paramétrisation de Perdew-Wang. Nous avons étudié 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. En outre, à la méthode (FP-LMTO), la dépendance de composition de l'indice de réfraction a été étudiée par le modèle de Reedy et Nazeer. La stabilité thermodynamique de ces alliages a été étudiée en calculant l'enthalpie ΔH_m aussi bien que du diagramme de phase. Un accord raisonnable est trouvé de la comparaison de nos résultats avec d'autres calculs théoriques.

Mots clés: AlP, InP, alliage, DFT, FP-LMTO.

Abstract

The aim of this work is to study the structural, electronic, optic and thermodynamic properties, of AlP and InP and their alloy. For this, we use the full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method in the framework of density-functional theory (DFT). The exchange and correlation energy is described in the local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) using Perdew-Wang parameterization. We have investigated 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 crossover of the direct, indirect band gap and the bowing. Using the approach of Zunger and coworkers, the microscopic origins of band gap bowing have been detailed and explained. In addition, to (FP-LMTO) method, the composition dependence of the refractive index was studied by Reedy and Nazeer model. The thermodynamic stability of these alloys was investigated by calculating the excess enthalpy of mixing ΔH_m as well as the phase diagram. A reasonable agreement is found from the comparison of our results with other theoretical calculations.

Keywords: AlP, InP, Alloy, DFT , FP-LMTO.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخواص البنيوية، الإلكترونية، البصرية و الحرارية لـ AlP و InP و خلائطهم، لهذا استعملنا طريقة FP-LMTO في إطار نظرية DFT ، استعملنا تقريب كثافة الموضع LDA وتقريب التدرج المعمم GGA بغية حساب كمون التبادل والارتباط، لقد درسنا تأثير العناصر على الخواص البنيوية مثل عناصر التوازن، كذلك حساب عامل الانضغاطية، و طاقات الفرق في البنية، أعطينا نتائج الاختلاف في الفرق في البنية المباشرة و غير المباشرة و أيضا عامل الإنحناء. باستعمال مقارنة Zunger و زملائه، المبادئ المجهرية لبنية معامل الإنحناء شرحت بطريقة مفصلة. و بالإضافة إلى ذلك، في طريقة (FP-LMTO)، درسنا معامل الإنكسار حسب نموذج Reedy و Nazeer . كما درسنا الإستقرار الحراري لهذه الخلائط بحساب ΔH_m و أيضا الرسم البياني للمراحل. النتائج المحصل عليها متوافقة مع النتائج النظرية.

كلمات افتتاحية: AlP ، InP ، خليط ، DFT ، FP-LMTO.