



RESUME DE THESE DE DOCTORAT

Nom & Prénom(s)	BELFEDHAL ABDELMOUNAIM
E-mail (obligatoire)	naimsoug@yahoo.fr
Spécialité	Physique
Titre	Contribution à l'étude des propriétés physiques des alliages $Al_xIn_{1-x}N$, et $PrFe_4P_{12}$ par la méthode ab initio FP-LMTO.
Date de soutenance	23/01/2014
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	Professeur AMERI MOHAMMED

Résumé :

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés structurales, électronique, des binaires AlN , InN et leur alliage $Al_xIn_{1-x}N$. pour ceci, nous avons utilisé la méthode FP-LMTO (Full Potential Linear muffin-tin orbitals) 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 de bande. Nous rapportons les résultats concernant la variation des structures de la bande directe et indirecte aussi que le paramètre de courbure (Bowling), en utilisant l'approche de Zunger et ses collègues, les origines microscopiques de la structure de bande du paramètre de courbure ont été détaillées et expliquées. En outre nous avons utilisé la méthode FP-LMTO pour étudier les propriétés structurales, élastique, électroniques et thermodynamiques du skutterudite $PrFe_4P_{12}$. Un accord raisonnable est trouvé de la comparaison de nos résultats avec d'autres calculs théoriques.

Mots clés : AlN , InN , skutterudite $PrFe_4P_{12}$, FP-LMTO, DFT.

Abstract

The aim of this work is to study the structural, electronic, properties of binary AlN , InN and their alloy $Al_xIn_{1-x}N$. for this, we used the FP-LMTO (Full Potential Linear muffin-tin orbitals) method in the framework of the theory of density functional theory (DFT). The exchange and correlation energy is described in the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA) using the Perdew-Wang parameterization. We have investigated the effect of composition on the structural properties such as the equilibrium parameter, the 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 the band gap bowing have been detailed and explained. In addition we have used the FP-LMTO method to study the structural, elastic, electronic and thermodynamic properties of skutterudite $PrFe_4P_{12}$. A reasonable agreement is found by comparing our results with other theoretical calculations.

Keywords : AlN , InN , skutterudite $PrFe_4P_{12}$, FP-LMTO, DFT.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة الخواص البنيوية، الإلكترونية للمركبات الثنائية AlN و InN و خليطهما الثلاثي $Al_xIn_{1-x}N$ ، لهذا استعملنا طريقة FP-LMTO في اطار نظرية DFT استعملنا تقريب كثافة الوضع LDA و تقريب التدرج المعمم GGA بغية حساب كمون التبادل و الارتباط. لقد درسنا تأثير تركيب العناصر على الخواص البنيوية مثل عناصر التوازن، حساب عامل الانضغاطية وطاقات الفرق في البنية، تحصلنا على نتائج الاختلاف في الفرق في البنية المباشرة و الغير المباشرة و ايضا على عامل الانحناء باستعمال مقاربة Zunger و زملائه و قد تم شرح المبادئ المجهرية لبنية معامل الانحناء بطريقة مفصلة و بالإضافة الى ذلك تم دراسة الخواص البنيوية، الإلكترونية، الترموديناميكية و خصائص المرونة للمركب $PrFe_4P_{12}$ وذلك باستخدام نفس الطريقة السابقة FP-LMTO. النتائج المتحصل عليها متوافقة مع النتائج النظرية.

كلمات مفتاحية : AlN , InN , skutterudite $PrFe_4P_{12}$, FP-LMTO, DFT.