

Résumé

Résumé

Le présent travail concerne l'étude théorique des propriétés structurales, électroniques et des alliages ternaires $Ca_{1-x} Sr_x S$ avec ($x= 0 ; 0.25 ; 0.5 ; 0.75 ; 1$) par la méthode de premier principe ab-initio FP-LAPW basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans la structure NaCl. Nous avons utilisé l'approximation de la densité la nouvelle approximation du gradient généralisé GGA. Les propriétés structurales sont déterminées à partir des calculs d'énergie totale.. alors avant d'étudier les alliages ternaires, nous discutons des composés binaires CaS, SrS. Nous avons calculé les paramètres du réseau, les modules de compressibilité, l'énergie fondamentale, les structures de bande et les densités d'états totales et partielles et partie réelle et une autre imaginaire de fonction diélectrique.

Abstract

Full-potential linearized augmented plane wave method (FP-LAPW) with in density functional theory has been used to calculate structural, electronic and optical properties of $Ca_{1-x} Sr_x S$, an alkali earth chalcogenide, with varying compositional parameter x in the range $0 < x < 1$. Whereas the structural properties are discussed in terms of charge transfer between the two cations, calculated electronic band structure and density of states have been analyzed in terms of contribution from the S p, Ca d and Sr d states. Furthermore, we have calculated some optical properties such as real and imaginary parts of dielectric constant, $\epsilon(\omega)$

And the calculated results have been discussed in comparison with the existing experimental data and other theoretical calculations.

ملخص

هذا العمل يتمثل في الدراسة النظرية للخصائص البنيوية والضوئية للسبائك الثلاثية حيث: $x = 0.25, 0.50, 0.75, 1$ ، وهذا بطريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا (FP-LAPW) والمرتكزة على نظرية كثافة الدالية (DFT). قمنا باستعمال تقريب التدرج المعمم (GGA) بنسبة للمركبات الثنائية (CaS, SrS)، والمركبات الثلاثية ($Ca_{1-x} Sr_x S$)، وهذا لحساب ثابت الشبكة الطاقة الكلية عصابات الطاقة كثافة الحالات والخصائص الضوئية

Nom et Prénom : ADDA Amina

Date de naissance : 13 /01/1985

Lieu de naissance : Tighalimet ; w.Sidi Bel-Abbés (Algérie)

Type de post-Graduation : Ecole doctorale

Sujet : Etude Ab-initio des Propriétés et structurales Electroniques et Optique des semi-Conducteurs $Ca_{1-x} Sr_x S$

Spécialité : physique

Option : Nano-sciences des matériaux ; Nano-technologie ; Nano-métrie

Email : amina.adda@yahoo.fr