

Nom & Prénom de l'étudiante	BENAICHA Mohamed
Intitulé du titre de Magister	Calcul des Propriétés électroniques des composés semi-heusler de types XPtSn (X=Ti, Zr et Hf):Description précise des écarts de bandes électroniques avec le potentiel modifié de Becke-Johnson (MBJ-LDA).
Date & lieu de soutenance	2013, Université de Sidi Bel-Abbés
Mail	m.benaicha22@yahoo.fr

Résumé de MEMOIRE de MAGISTER

Dans ce mémoire, on a présenté un Calcul des Propriétés électroniques des composés semi-heusler de types XPtSn avec X(Ti,Zr,Hf) ,pour cela nous avons utilisé la méthode des ondes augmentées linéairement au potentiel (FP-LAPW)basé sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT).nous avons aussi étudié les propriétés structurales et les propriétés électronique avec l'approximation LDA pour le potentiel d'échange et de corrélation ,ainsi on a appliqué une version modifié de potentiel propose par propose par Becke et Johnson (MBJ) à nos composés pour but de calculer la Gap. Et enfin ,nous avons calculé les constantes élastiques pour ces composés.

Mots clés : DFT; FP-LAPW; MBJ; Structure électronique; Thermoélectrique; Semi-Heusler.

Abstract

In this work, we presented a Calculation of electronic properties of semi-Heusler compounds types XPtSn with X (Ti, Zr, Hf), for this we used the method of linear augmented plane wave (FP-LAPW) based on the theory of density functional (DFT). We also studied the structural and electronic properties with the LDA approximation for the potential for exchange and correlation, and we applied a modified version of potential proposed by Becke and Johnson proposed by (MBJ) to our compounds designed to calculate the Gap. And finally, we have calculated the elastic constants for these compounds.

Keywords: DFT, FP-LAPW; MBJ ; Electronic structure ;Thermoelectric; Half-Heusler.

ملخص

في هذه دراسة ، قدمنا حساب الخصائص الالكترونية للمركبات شبه Heusler أنواع XPtSn مع X (Ti, Zr, Hf)، لهذا قمنا باستخدام طريقة زيادة محتملة موجة خطيا (FP-LAPW) على أساس نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). درسنا أيضا الخصائص الهيكلية والإلكترونية مع تقريب LDA عن إمكانية تبادل والارتباط وطبقنا نسخة معدلة من المحتمل اقترحها Becke و Johnson التي اقترحها (MBJ) لمركبات لدينا مصممة لحساب هذه الفجوة. وأخيرا فقد قمنا بحساب الثوابت المرنة لهذه المركبات.

كلمات الرئيسية: DFT، FP-LAPW؛ MBJ؛ هيكل الإلكترونيّة؛ الحرارية؛ نصف Heusler.