

Titre : Etude du premier principe des propriétés structurales et électroniques du composé ternaire $\text{CaTe}_x\text{Se}_{1-x}$

Présenté par : BENMEDJAHED Toufik

E-mail : djamilseg@hotmail.com

Encadré par : Pr. SEHIL Mohamed

Spécialité : Sciences physiques.

Option : Physique des matériaux

Résumé

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés structurales et électroniques des binaires CaS et CaTe et leur alliage. Pour ceci, nous avons utilisé la méthode LMTO (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) en employant la paramétrisation de Perdew-Wang. Nous avons étudiés 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 conclusion, un accord raisonnable est trouvé de la comparaison de nos résultats avec d'autres calculs théoriques.

Mots clés : CaS ; CaTe ; Alliage ; bowing ; FP-LMTO.

Abstract

The aim of this work is to study the structural and electronic properties of CaS and CaTe 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) 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 bowing.

Finally, a reasonable agreement is found from the comparison of our results with other theoretical calculations.

Keywords: CaS ; CaTe ; Alloy ; bowing ; FP-LMTO.

ملخص

لقد قمنا بدراسة الخصائص الهيكلية و الإلكترونية الضوئية لأشباه الموصلات ٢-٦ باستخدام عمليات حسابية استنادا إلى مبادئ نظرية الكثافة الوظيفية. في هذا العمل، سنوضح تشابه البنية الإلكترونية لهذه المواد مع أشباه الموصلات ٢-٦ من خلال تحليل ثوابت المشبك، طاقات الهوة و الثوابت العازلة الساكنة في الضغط الاعتيادي

المفاتيح: CaS; CaTe; المزيج; FP-LMTO