



RESUME DE MEMOIRE DE MAGISTER

Nom & Prénom(s)	DJELLOUL Nasreddine
E-mail (obligatoire)	nasridjl@gmail.com
Spécialité	Electronique
Titre	Etude des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires II-VI ZnS, ZnSe, CdS, CdSe, leurs alliages semiconducteurs et d'hétérostructures associées. Application aux lasers
Date de soutenance	03/07/2013
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	ABID Hamza Professeur

**Résumé :**

Les propriétés structurales; électroniques et optiques des sulfures (ZnS; CdS) et des séléniures (ZnSe; CdSe) ont été étudiées dans la phase zinc blende. Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul FP-LMTO qui se base sur la DFT. Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisés (GGA) pour calculer les propriétés structurales; électroniques et optiques. Les valeurs du paramètre de réseau d'équilibre sont en accord avec les résultats expérimentaux disponibles. Les résultats obtenus pour la structure de bandes en utilisant la GGA montrent un désaccord avec de l'expérience et les calculs théoriques, car les approximations LDA et GGA généralement sous-estiment les gaps d'énergie. L'analyse de la partie imaginaire lors de l'étude des propriétés optiques, confirme l'existence d'un gap d'énergie entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction au point  $\Gamma$ . Nous avons utilisés le calcul des structures de bandes et la densité d'état de l'alliage ZnCdSSe en utilisant la méthode du pseudopotentiel. Les composés ZnSe et ZnS ont un grand intérêt dans le domaine d'électronique en général et optoélectronique en particulier.

**Mots clés :**

Semi-conducteur, binaire, bande interdite, indice de réfraction, boîtes quantiques, méthode graphique, optimisation, température.

كبريت الزنك CdSe ZnSe CdS ZnS الثنائية  $\gamma$   $\gamma$   $\gamma$   
تتبع على نظرية الكثافة (DFT). نتائج قيم الفاصل الطاقى بالنسبة لكل السبائك تظهر  
أنها غير موافقة للتجربة و هذا راجع لخصائص التقريب (GGA).  
الخصائص الضوئية عن طريق حساب عصابات الطلاقة و كثافة الحالات للسبيكة الرباعية ZnCdSSe باستعمال طريقة

وجه  $\gamma$   $\gamma$   $\gamma$   $\gamma$   $\gamma$  لها ZnS ZnSe

مفتاحية:

السبائك الثنائية، كثافة الحالات و الخصائص الضوئية .