Résumé

En utilisant le code Wien2K, nous étudions les propriétés structurales et électroniques du métal alcalino -terreux $CaZn_{1-x}S_x$ pour différentes concentrations $0 \leq x \leq 1$ avec un incrément de 0.25. Les calculs sont effectués par la méthode des ondes planes linéairement augmentées et a potentiel total plus les orbitales locales (FPL/APW+lo), basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Concernant le potentiel d'échange-corrélation, nous avons utilisé la nouvelle approximation du gradient généralisé GGA. Les propriétés structurales sont déterminées à partir des calculs d'énergie totale. Nous discutons aussi la structure électronique, les densités d'états totales, partielles et les densités de charge. Nous déduisons que les matériaux CaZn, $CaZn_{0.25}S_{0.75}$ et $CaZn_{0.5}S_{0.5}$ ont un caractère métallique, le CaS a un caractère semi-conducteur et finalement le $CaZn_{0.75}S_{0.25}$ est semi-métallique.

Abstract

Using the Wien2K code, we investigate the structural and electronic properties of the alkali earth metal $CaZn_{1-x}S_x$ for several concentrations in the range $0 \leq x \leq 1$ with an increment of 0.25. The calculations are performed by a developed full-potential augmented plane wave plus local orbitals (FP-L/APW+lo) method within the spin density functional theory. Concerning the exchange-correlation potential, we used the new generalized gradient approximation GGA form. Structural properties are determined from the total energy calculations. As well, we discuss the electronic structures, total and partial densities of states and charge densities. We deduce that the CaZn, $CaZn_{0.25}S_{0.75}$ and $CaZn_{0.5}S_{0.5}$ materials have a metallic character, the CaS has a semiconductor character and finally, the $CaZn_{0.75}S_{0.25}$ is semimetal.

ملخص

باستخدام رمزWien2K نقوم بدراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية لمعادن الأرض الألكانية $CaZn_{1-x}S_x$ لتركيزات مختلفة $0 \leq x \leq 1$ مع زيادة قدرها 0.25. يتم إجراء العمليات الحسابية من خلال طريقة الموجات المستوية الزائدة خطيا ولفرق كمو كلي زائد المدارات المحلية (FP-L/APW+lo)، استنادا إلى نظرية الكثافة الوظيفية. وفيما يتعلق بفرق كمو التبادل و الإرتباط ، استخدمنا التقريب الجديد للإنحدار المعمم GGA. يتم تحديد الخصائص الهيكلية من عمليات حساب الطاقة الكلية. نتناقش أيضا الهيكل الإلكتروني ، كثافات الحالة الكلية و الجزئية، و كثافات الشحن. نستنتج أ السبائك CaZn, $CaZn_{0.25}S_{0.75}$ لها طابع معدني،ال CaS له طابع شبه موصلي، وأخيرا ال $CaZn_{0.75}S_{0.25}$ فهو شبه معدني.