

Nom : TOUIA

Prénom: Amina

Intitulé du sujet : CONTRIBUTION A L'ETUDE AB-INITIO DES
PROPRIETES STRUCTURALES ET ELECTRONIQUES DE L'ALLIAGE
BaSSe PAR L'APPROCHE DE ZUNGER.

Domaine : sciences de la matière (SM).

Spécialité : physique

Option : modélisation et simulation numérique

Email: anima11@live.fr

ملخص:

حسابات المبدأ الأولي التي استخدمت لدراسة الخصائص البنيوية و الإلكترونية للمركب الثلاثي $\text{BaS}_{(1-x)}\text{Se}_x$. باستعمال طريقة (FP-LMTO) والتي تركز على نظرية كثافة الدالية (DFT). في هذه النظرية قمنا باستعمال تقريب كثافة الموضع (LDA) و تقريب التدرج المعمم (GGA) لأجل حد كمون التبادل و الترابط (XC). لقد قمنا بدراسة تأثير معامل التركيز على ثابت الشبكة ثابت الصلابة، فاصل الطاقة و الكتلة الفعالة. تحولات ثابت الشبكة، من قانون Vegard و ثابت الصلابة الذي يتغير خطياً مع معامل تركيز قد تمت ملاحظتها للمركب الثلاثي $\text{BaS}_{(1-x)}\text{eS}_x$. باستخدام الطريقة التقريبية Zunger و وزملاء العمل، تم تقدير عامل الانحناء و تفسيره. علاوة على ذلك، هناك تطابق مرضي بين نتائج المحصل عليها و بين المعطيات التجريبية و النظرية المتوفرة.

الكلمات المفتاحية: شبه ناقل، FP-LMTO، عامل الانحناء، الكتلة الفعالة.

Résumé:

Les calculs du premier principe ont été utilisés pour étudier les propriétés structurales et électroniques de l'alliage ternaire $\text{BaS}_{(1-x)}\text{Se}_x$. On utilise la méthode linéaire des orbitales muffin-tin et à potentiel complet (FP-LMTO) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Dans cette approche, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Nous avons étudié l'effet de la composition sur les propriétés structurales telles que le paramètre d'équilibre, le module de compressibilité, l'énergie du gap, et la masse effective. les déviations de la constante du réseau et le module de compressibilité qui varie linéairement avec la composition x en fonction de la loi de Vegard's ont été observés pour l'alliage ternaire $\text{BaS}_{(1-x)}\text{Se}_x$. On utilisant l'approche de Zunger et ces collègues, les origines microscopiques de la structure de band du paramètre de courbure ont été détaillées et expliquées. Un accord raisonnable est trouvé de la comparaison de nos résultats avec d'autres calculs théoriques et expérimentaux.

MOTS CLES: semi-conducteur, FP-LMTO, paramètre de courbure, masse effective.

Abstract:

First-principles calculations have been used to study the structural and electronic properties of $\text{BaS}_{(1-x)}\text{Se}_x$ ternary alloy using full-potential muffin-tin orbital's (FP-LMTO) method within density functional theory (DFT). In this approach, the local-density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) are used for the exchange-correlation (XC) potential. The effect of composition on lattice parameter, bulk modulus, band gap and effective mass was investigated. The deviations of the lattice constant from Vegard's law and the bulk modulus from linear concentration dependence were observed for $\text{BaS}_{(1-x)}\text{Se}_x$ alloy. The microscopic origins of bowing parameter were explained using approach of Zunger and co-workers. Accordance is found from the comparison of our results with other experimental and theoretical calculations.

KEYWORDS: Semiconductor, FP-LMTO, bowing, Effective mass.