

étude des propriétés structurales, électroniques, optiques et thermodynamiques des alliages ternaires $Al_{1-x}B_xP$, $Al_{1-x}B_xAs$, $Al_{1-x}B_xSb$

Khaled BOUBENDIRA

Soutenu en: 2015

Abstract: Dans ce travail, des calculs de premier principe ont été effectués sur les propriétés structurales, électroniques, optiques et thermodynamiques des alliages ternaires $Al_{1-x}B_xP$, $Al_{1-x}B_xAs$ et $Al_{1-x}B_xSb$. La méthode des ondes planes augmentés et linéarisées basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a été utilisée. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA) employant la paramétrisation de Wu- Cohen (WC). En outre, l'approximation de Becke-Johnson (mBJ) a été utilisée pour calculer les propriétés électroniques. L'effet de la composition sur la constante du réseau, le module de compressibilité, le gap énergétique et l'indice de réfraction a été étudié. Les déviations des constantes du réseau par rapport à la loi de Végard et des modules de compressibilité par rapport à la loi de dépendance linéaire (LCD) ont été observées pour ces alliages. Les origines microscopiques du facteur de "bowing" du gap énergétique ont été expliquées par l'approche de Zunger. La stabilité thermodynamique de ces alliages a été expliquée en calculant le diagramme de phase.

Keywords : DFT, FP-LAPW, WC-GGA, mBJ