

Etude des propriétés structurales, élastiques, électroniques, et optiques des matériaux CuS et CuTe par la méthode FP-LMTO

Alaa BOULEGANE

Soutenu en: 2015

Abstract : Nous avons présentés Dans ce travail, une étude théorique par modélisation des propriétés structurales, élastiques, électroniques, et optiques du composé CuS sous la structure Hexagonale et du composé CuTe sous la structure orthorhombique. Les calculs ont été effectués par la méthode (FP-LMTO) qui se base sur le formalisme de la fonctionnelle de la densité (DFT), en utilisant les approximations de la densité locale (LDA) et du gradient généralisé (GGA). Les propriétés structurales telles que les paramètres de maille (a) et les modules des compressibilités et ses dérivés (B_0 et B'), sont calculés dans les phases hexagonale et orthorhombique respectivement. Les résultats trouvés sont en accord avec ceux avancés par l'expérience, ainsi que d'autres calculs théoriques. L'étude des propriétés électroniques du CuS, et CuTe nous a mené a des valeurs du gap d'énergie calculé par les deux approximations LDA et GGA, sont en accord avec ceux d'autres calculs. A fin de comprendre les propriétés optiques nous avons calculés la fonction diélectrique

Keywords : DFT, FP-LMTO, GGA, LDA, CuS, CuTe