

**UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI
BOUMEDIENE (U.S.T.H.B)**

**Département de Physique des Matériaux et Composants
Faculté de Physique**

**EFFETS D'ELEMENTS D'ADDITION SUR LES PROPRIETES DU SYSTEME
METALLIQUE BINAIRE Cd-Zn (*)**

Résumé de thèse de Doctorat 3^{ème} cycle

Présenté par

BAHLOUL Brahim ()**

Résumé :

Notre travail est une contribution, d'une part, à l'étude des propriétés structurales, électroniques et élastiques des systèmes, binaire CdO et ternaire $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{O}$ à différentes concentrations x de Zn ($x = 0.005, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.045$); et d'autre part, à l'étude des systèmes binaires ZnCd, ZnTe, CdTe et ternaire ZnCdTe. Nous avons, notamment, mené une étude comparative des systèmes binaires Cd-Zn et ternaires CdZnX ($X = \text{O}$ et Te), pour mettre en évidence l'effet de l'oxygène ou du tellure sur les propriétés du ZnCd. Tous les calculs ont été effectués en utilisant une approche ab-initio ou de premiers principes, à l'aide du code ABINIT, qui implémente la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT à travers la résolution des équations de Kohn et Sham. La fonctionnelle d'échange et de corrélation est traitée par l'approximation de la densité locale (TP-LDA) générée par Teter-Pade, ainsi que l'approximation du gradient généralisé (PBE-GGA) générée par Perdew-Burke-Ernzerhof. Pour le traitement des alliages ternaires, nous avons utilisé l'approximation du cristal virtuel (VCA). Ainsi, en partant d'une même base binaire métallique CdZn, dont la structure de bandes présente un chevauchement entre les bandes de conduction et de valence, nos simulations ont pu aboutir à des systèmes semi-métalliques (ZnCdO) et semi-conducteur (ZnCdTe), suite à l'addition d'éléments ternaires tels que l'oxygène et le tellure. Nous avons conclu que l'effet de l'adjonction de ce dernier est mieux reproduit par nos simulations de DFT que celui du premier, sachant que le chevauchement des bandes a pu être levé pour le tellure avec un gap positif, et pour l'oxygène avec un gap négatif.