

a) Mémoires de master soutenus

	Nom & Prénom de l'étudiant	BENKABOU Mohamed –El- Habib
	Date et lieu de soutenance	29/09/2011 Faculté des sciences UDL de Sidi-bel-abbes
	Rapporteur	F .Z. Aoumeur-Benkabou
	Intitulé du titre du master	Etude des propriétés structurales et électroniques des binaires ZnO et MgO et leur alliage par la méthode FP-LMTO.
	résumé	<p>En résumé, en utilisant la méthode FP-LMTO on a étudié les propriétés structurales et électroniques de ZnO et MgO dans leurs structures cubiques B1 et B3 par les approximations LDA et GGA, on a étudié leur stabilité : pour ZnO c'est la phase zincblende (B3) et pour MgO c'est NaCl(B1).pour les structures de bande : ZnO et MgO présentent un gap direct.</p> <p>pour l'alliage $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$, on a déterminé : le paramètre de maille a, le module de compressibilité B et sa dérivée B' pour les concentrations ($x= 0.25 ; 0.5 ; \text{ et } 0.75$) et cela dans la structure (B1) suivant la loi de Vegard. L'alliage présente un gap indirect. On a également étudié le comportement du bowing chimique (désordre) de l'alliage pour les 3 concentrations en utilisant la technique de Zunger, on a constaté que la contribution chimique (l'échange de charge) est plus importante que les effets de structure et de déformation.</p> <p>Les calculs présentés dans ce mémoire ont l'originalité d'être effectués par la méthode FP-LMTO. La fiabilité de nos résultats montre que c'est une méthode efficace.</p>