

Intitulé du Doctorat : Doctorat 3^{ème} cycle LMD

Filière : Physique

Option : Physique des Matériaux

Domaine : Sciences de la matière

Nom et prénom du doctorant : ADDOU Oussama

Titre de la thèse : Etude comparative des propriétés structurales, électroniques, optiques et thermoélectriques des alliages à base de bismuth et à base de lanthanides.

Nom de la Directrice de la thèse : TOUIA Amina

Grade : MCA ; **Etablissement de rattachement :** Université d'Ain Témouchent- Belhadj Bouchaib -

Laboratoire d'accueil (établissement de rattachement) : Sciences Matériaux Appliquées (LSMA)

Nom et Prénom du co- Directrice de la thèse : BENYAHIA karima

Grade : MCA ; **Etablissement de rattachement :** Université d'Ain Témouchent- Belhadj Bouchaib -

Laboratoire d'accueil (établissement de rattachement) : Sciences Matériaux Appliquées (LSMA).

Abstract:

The present work is a study of physical properties (structural, electronic, optical, and thermoelectric...ect), alloys based on bismuth, and lanthanides. This will allow us to define the problem of phase stability as well as the problem of the role of electrons in this stability using the method of augmented and linearized plane waves at total potential (FP-LAPW) implemented in the Wien2k code. Materials based on bismuth and lanthanides have been intensively studied because of their numerous technological applications, especially in the fields of spintronics, optoelectronics and thermoelectrics (renewable energy sources).

Keywords: DFT, FP-LAPW, electronic, optical, thermoelectric, bismuth, lanthanides

Résumé :

Le présent travail s'agit d'une étude des propriétés physique (structurales, électroniques, optique, et thermoélectriques....ect), des alliages à base de bismuth et lanthanides. Cela nous permettra de définir la problématique de la stabilité des phases, ainsi que la problématique du rôle des électrons dans cette stabilité en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k. Les matériaux à base de bismuth et lanthanides ont été intensivement étudiés à cause de leurs nombreuses applications technologiques surtout dans le domaine de spintronique, optoélectronique et thermoélectrique (sources des énergies renouvelables).

Mots Clés :

DFT, FP-LAPW, électroniques, optiques, thermiques, bismuth, lanthanides.

ملخص :

هذا العمل عبارة عن دراسة للخصائص الفيزيائية (الهيكليّة ، الإلكترونيّة و الكهروحراريّة ... إلخ) ، للمركبات القائمة على البزموت و اللانثانيدات. سيسمح لنا ذلك بتحديد مشكلة استقرار، وكذلك مشكلة دور الإلكترونيات في هذا الاستقرار باستخدام طريقة الموجات المستوية والخطية (FP-LAPW) المطبقة في برنامج Wien2k. تمت دراسة المواد التي تعتمد على البزموت و اللانثانيدات بشكل مكثف بسبب تطبيقاتها التكنولوجية العديدة ، خاصة في مجال الإلكترونيات الضوئية والكهرباء الحراريّة (مصادر الطاقة المتجددة).

الكلمات المفتاحية : DFT ، FP-LAPW ، الإلكترونيات ، الضوئية ، الديناميك الحراريّة ، البزموت ، اللانثانيدات.