

## TP1

### Etude des propriétés du Si-Ge-GaAs

#### Objectif du TP :

On propose dans ce TP d'étudier les propriétés électroniques des semi-conducteurs suivants : **Si-Ge-GaAs**, en utilisant un logiciel de simulation FP-LMTO, ce logiciel est conçu pour calculer les différentes propriétés des matériaux tel que : structurales, électroniques, optiques...

Dans ce TP nous nous intéresserons à :

- La structure cristalline.
- La structure des bandes.
- La densité d'état.
- La masse effective.

#### **Introduction des données :**

Dans **database** on introduit les données d'entrées c'est-à-dire le paramètre de réseau, numéro atomique et le rayon muffin-tin.

#### **L'application Mstudio :**

**Bandlab :** elle est utilisée pour configurer les données d'entrées, exécuter des calculs et analyser les données de sortie.

Pour appeler la base des données (database), appuyer sur database situé dans la partie supérieure à droite de la fenêtre des bandes, sélectionner **semiconductors**, **Si** puis **load data** (pour stocker les données) en fin fermer la fenêtre.

Pour calculer les différentes propriétés telles que le gap, la densité d'état et la masse effective, nous suivrons les étapes suivantes :

- Cliquer sur **properties** — ~~find~~ **property** :

**1-atomes & structure :** a fin de visualiser la structure cristalline, on utilisera la touche **prepare** ensuite **compute** une fois le calcul sera terminé, un cadre s'affichera cliquer sur **visualize**.

**2- Fat bands (gaps) :** on commencera par la densité de charge (**charge density**) puis compute.

Après que le calcul se terminera, cliquer sur **fat bande** ensuite **compute**.

Un cadre « **fat bands visualization** » s'affichera à droite, Entrer des limites inférieures et supérieures de l'énergie ainsi que la position de l'énergie de Fermi en **eV**.

#### **3-La densité d'état :**

Pour calculer la densité d'états, faites entrer les deux énergies minimales et maximales dans **eV**. Vous avez également une option pour entrer Nombre de divisions pour la zone de Brillouin. Le programme calcule et stocke le fichier avec une extension .dos qui peut être visualisés.

Afin de visualiser la densité des états et les contributions partielles, utilisé le cadre **Visualize Density of States**. Entrer des limites inférieures et supérieures de l'énergie ainsi que la position de l'énergie de Fermi en eV.