

Etude théorique des propriétés optiques des Ge_n ($n=2, 3, 4$) clusters

Meriem BENAIDA, Kamal Eddine AIADI
Laboratoire de Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables en Zones
Aride, Université de Ouargla, 30000 Ouargla, Algeria

1- Résumé

Les semi-conducteurs ont une grande importance dans des applications de dispositifs électroniques, optoélectronique et cellules solaires. Le germanium est les semi-conducteurs le plus utilisé dans ce domaine. L'étude des propriétés optiques des clusters de germanium peut contribuer à la recherche dans le domaine des matériaux utilisés pour l'optoélectronique et pour les cellules solaires.

Dans ce travail on peut trouver des matériaux candidats qui peuvent être à la hauteur, ou mieux, des matériaux utilisés dans les détecteurs et sources optiques.

2- **Mots clés:** cluster ; propriétés optiques ; Germanium ; DFT ; cellules solaires.

3- **Plan de la thèse**

Etude bibliographique

Etude générale des clusters Germanium

Choix des logiciels

Calculs et résultats

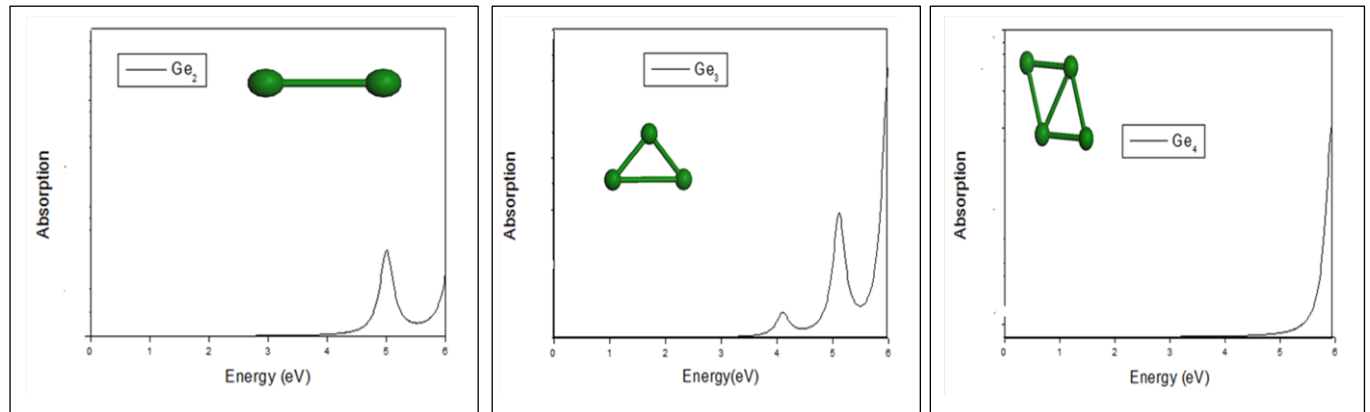
Exploitation des résultats et discussion

Conclusion

4- **Abstract Graphique**

Nous présentons une étude théorique des spectres d'absorption des clusters de germanium Ge_n ($n = 2; 3; 4$). En utilisant les premiers principes du recuit simulé pseudopotentiel dans l'approximation du gradient généralisé (GGA) de la densité

fonctionnelle implémentée dans la méthode SIESTA et code Quantum Espresso (QE)
pour les calculs optiques.



Spectres d'absorption des clusters Ge_n (n=2, 3, 4)

5- References Bibliographies

- (1) N. Kapila, I. Garg, V.K. Jindal, H. Sharma, J. Magn. Mater. 324(2012)2885.
- (2) N. Kapila, V.K. Jindal, H. Sharma. Chem. A 110(46)(2011)12670.
- (3) X.Li, K. Su, X. Yang, L. Song, L. Yang, Comput. Theor. Chem. 1010(2013)32.
- (4) S. Shi, Y. Liu, C. Zhang, B. Deng, G. Jiang, Comput. Theor. Chem. 1054 (2015).
- (5) S. Mahtout, M.A. Belkhir, Physica E 40 (2008) 2884.