

Etudes des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des systèmes Gen et CuGen (n=2-20) : étude à travers la DFT

C. Siouania, S. Mahtouta et F. Rabilloudb

aLaboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université de Bejaia, 06000 Bejaia, Algérie.

bInstitut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon1 -CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne Cedex, France
siouanichaouki@gmail.com Tel : +213 661176315

Résumé

Dans ce présent travail, nous étudions les propriétés électroniques et magnétiques des nanostructures de germanium pures et de germanium dopées par le cuivre (CuGen) dans le rang de 2 à 20 atomes. Ce travail est purement théorique et se fait dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec les pseudopotentiels implémentés dans le code de calcul SIESTA. Le but de ce présent travail est de faire une investigation des propriétés structurales, électroniques et magnétiques de ces systèmes de très faibles tailles. Nous avons montré qu'il existe une forte corrélation entre les propriétés électroniques et magnétiques de ces nanostructures avec les propriétés structurales de ces petits systèmes. Les résultats obtenus montrent que les tailles des systèmes influents considérablement sur la structure et les propriétés électroniques et magnétiques des clusters de CuGen. Nous avons aussi montré que le dopage avec un atome de cuivre influe d'une manière significative sur la stabilité des clusters initiaux de germanium pur et que les énergies de cohésion augmentent avec l'augmentation de la taille des clusters. Les gaps HOMO-LUMO des clusters de Gen et CuGen diminuent lorsque la taille des clusters augmente. Les gaps

HOMO-LUMO en spin up sont nettement plus élevés que les gaps en spin down. Ce qui acquière à nos clusters une propriété importante qui pourra avoir de répercussions sur beaucoup d'éventuelles applications en nanotechnologie à l'avenir comme la dans le domaine de la spintronic. Le moment magnétique diffère d'un cluster à un autre et dépend de la taille, de la structure de ces clusters et essentiellement de la position de l'atome Cu dans les clusters et de la distance entre l'atome de Cu et les atomes Ge voisins. Par ailleurs et pour plus de détails sur le comportement électroniques des ces systèmes, les potentiels d'ionisation, les affinités électroniques, les duretés chimiques et les densités d'états totales et partielles sont calculés et analysés.

Mots clés: ab initio, DFT, SIESTA, pseudopotentiels, clusters, propriétés structurale, propriétés électroniques, propriétés magnétiques.