République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Sétif 1

Habilitation Universitaire



Présentée à la faculté des sciences
Département de Physique

Option : Physique du solide

Par

Dr. DJELLAL CHERRAD

Synthèse des travaux scientifiques

Année Universitaire : 2013/2014

Sommaire

I - Introduction générale …….. ..... **1**

II. Synthèse des travaux scientifiques réalisés avant le Doctorat ès sciences …..... **3**

II-1. Mémoire de Magister…… ……. **3**

III. Synthèse des travaux scientifiques réalisés en Doctorat ès sciences …… **6**

III-1. Thèse de Doctorat……. **6**

IV. Synthèse des travaux scientifiques réalisés après le Doctorat ès sciences …….. **8**

IV-1. Publications internationales …….. **8**

IV-2. Projets de Recherches scientifiques …… **11**

IV-2-a. Participation au projet de recherche CNEPRU…….……. **11**

V. perspectives ……...…… **11**

VI. Synthèse des travaux pédagogiques réalisés avant et après le recrutement ……. **12**

VI-1. Responsabilités Pédagogiques…….. **12**

VI-1-a. Responsable de module de Phys1 et Phys 2 durant l'année 2010/2011…… **12**

VI-1-b. Responsable de module de Phys7 durant l'année 2010/2012…… **12**

VI-2. Assistanat Pédagogique……...……... **13**

VI. Bibliographie ……...…… **13**

I- Introduction

Actuellement le progrès technologique et industriel dépend fortement de l'avancement des matériaux. La conception des matériaux par ordinateur est devenue actuellement le moyen le plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Ceci reflète les développements récents dans la théorie électronique pour l'explication de plusieurs résultats expérimentaux et la prédiction des propriétés physiques des matériaux qui n'ont pas encore été conçus. En plus la technologie des semi-conducteurs a donné la possibilité de mettre en œuvre des matériaux artificiels, tels que les super-réseaux, puits quantiques, couches minces fabriquées par plusieurs techniques de la croissance des couches cristallines. Actuellement on peut fabriquer des matériaux avec des nouvelles propriétés qui ne se trouvent pas dans la nature**.**

Il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théoriques qui peuvent expliquer les observations expérimentales, et surtout d'effectuer des simulations ou « des expériences virtuelles » qui peuvent prédire le comportement des matériaux là où l'expérience réelle fait défaut, ou qu'elle soit très coûteuse et parfois difficilement réalisable. Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie vers les meilleurs choix avec un coût minimum. La connaissance de toutes les propriétés d'un matériau donné est étroitement liée à la détermination de son énergie totale.

La première différence que l'on peut constater entre les matériaux c'est la nature de leurs liaisons (covalentes, ioniques, métalliques, …). Les premières approches ont alors évidemment cherche à modéliser cette dernière à l'échelle atomique. Ceci a donné naissance à un grand nombre d'approches classiques empiriques, semi-empiriques ou *Ab Initio*. Cependant, si le but est de déterminer les propriétés électroniques et optiques, le cristal ne doit pas être décrit par un simple système d'atomes, mais il s'avère indispensable de tenir compte des électrons, et ainsi de traiter un système d'ions et d'électrons en interaction. Toute la difficulté réside dans le fait qu'un tel système ne peut être décrit par les lois de Newton classiques, mais il est régit par la mécanique quantique, autrement dit par l'équation de Schrödinger.

Les premières méthodes «quantiques » développées dans ce but, sont celles de Hartree et de Hartree-Fock. Moyennant certaines approximations, on transforme la fameuse équation de Schrödinger en un système d'équations que l'on peut résoudre numériquement. Ces méthodes soufrent cependant de deux inconvénients : elles nécessitent un calcul énorme pour un solide, et surtout, elles omettent la corrélation électronique, qui est la principale caractéristique du comportement quantique des électrons. Ces problèmes ont put être contournés avec l'avènement de la théorie de la fonctionnelle de densité « DFT » qui est basé sur les deux théorèmes de Hehoneberg et Kohn (1964) [1], où l'équation de Schrödinger est remplacé par une autre équivalente mais ayant pour seule variable la densité électronique.

L'approximation de la densité locale LDA [2], avec ses extensions relativement récentes GGA [3] et EV-GGA [4], a apporté la solution qui permit aux méthodes quantiques, dites aussi méthodes du premier-principe, de se développer et d'arriver à un stade très élaboré. Il est possible actuellement de calculer l'énergie totale, la structure de bandes et toutes les propriétés qui en découlent, avec une précision très satisfaisante. Dans la pratique, pour déterminer l'énergie totale dans le cadre de la DFT, il est nécessaire de passer par la résolution auto-coherente et d'une forme approximative du potentiel d'echange-corrélation d'un système d'équations, dites équations de Kohn et Sham [5]. La procédure nécessite le choix d'un potentiel ionique et d'une base de fonctions d'onde et une forme approximative du potentiel d'échange-corrélation qui servira à développer les fonctions propres de l'Hamiltonien lors de la résolution du système d'équations.

Dans nos travaux, dans un premier volet, nous avons proposé de d'étudier l'aspect fondamental des propriétés physique des matériaux perovskites. Nous avons essayé d'étudier l'influence de la structure de ces matériaux sur leurs propriétés physique (mécanique y'a compris l'élasticité, électronique et optique. Dans ce stade, on a tenté dans nos articles publiés de faire un assemblage de propriétés en manifestant des constatations de corrélation remarquable. Nous avons conclu plus qu'une fois que les aspects fondamentaux dans ce type de matériaux sont énormément attachés entre eux.

Dans un deuxième volet, nous étions intéressé par la distorsion dans les cristaux perovskites afin de rapprocher notre étude à la réalité pratique. A ce propos, la structure parfaite est rarement rencontrée, on trouve généralement des structures distordues où la forme cristalline de distorsion est traduite en terme de stabilité structurale.

En outre, l'étude des matériaux perovskites en tant que des massifs poly cristallins ou bien des blocs monocristallins orientés préférentiellement selon (001) en terme de spin polariser nous a attiré dernièrement. Nous avons essayé de faire une analyse électronique du comportement magnétique de base de deux perovskites métalliques de manganèse qu'on admis pour l'étude. Nous avons remarqué que les blocs monocristallins orienté préférentiellement selon (001) préserves un peu plus de magnétisme du faite que d'autres liaisons électroniques entre les trois type d'atomes existant s'en apparaisse.

II. Synthèse des travaux scientifiques réalisés avant le Doctorat ès sciences

II-1. Mémoire de Magister :

Le mémoire de magister que j'ai soutenu sous la direction du Pr. Saad Hamzaoui (Département de physique, faculté des sciences, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran – Mohamed Boudiaf- USTO-MB-) s'intitule :

« Élaboration et Etude technologique des couches minces TCO de type « n »et « p » par micro pipetage et procédé rf, Application : à la détection des polluants, radiations ultraviolettes et la jonction « pn ». »

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du Laboratoire de Microscopie Electronique et des Sciences des Matériaux *« L.M.E.S.M.»* de l'Université des Sciences et de la Technologie d'Oran « Mohammed Boudiaf » USTO-MB.

L'élaboration de couches minces de matériaux semi-conducteurs tels que le ZnO, SnO_2 et $CuInSe_2$ par diverses techniques de dépôt *(pulvérisation cathodique RF, évaporation thermique, la technique Pyrolyse Spray, le procédé Silar…)*, l'analyse et la caractérisation de ces couches, ainsi que la réalisation et la caractérisation des dispositifs électroniques *(capteur à gaz, photopiles solaires, dispositifs Piézo acoustique SAW, capacité M.O.S…)* font l'objet principal des recherches et des études menées au laboratoire *« L.M.E.S.M.»*.

ZnO et SnO_2 sont les plus importants oxydes métalliques semi-conducteurs avec un gap direct de largeurs d'environ *(3.37 eV et 3.95eV)* respectivement, Ils sont Largement répandus dans l'électronique en tant qu'électrodes transparentes, couches fenêtres conservatrices d'énergie dans les cellules solaires, et sont également employés pour la détection des gaz réducteurs et oxydants, Les propriétés des films d'oxydes métalliques dépendent de leur déviation de la stoechiométrie, de la nature, la quantité d'impuretés, et de la microstructure [6] également le ZnO a connu un développement dans le domaine des détecteurs *UV (métal/semi-conducteur/métal)*ou *(métal/semi-conducteur)* avec une grand variétés de types de contacts *(ohmique, Schottky)* [7-8] le ZnO est connu par sa stabilité dans un milieu plasmagène en hydrogène H_2 par exemple par rapport à SnO_2, La non-toxicité et l'abondance sur Terre des composants à base de ZnO font de lui un candidat idéal, et un concurrent économique et technologique sérieux comparé à d'autres oxydes métalliques [9]. Aussi le ZnO présente l'un des coefficients de couplage électromécanique des plus élevés de tous les composés non ferroélectriques, d'où son usage très répandu, sous forme de couche mince, comme transducteur pour dispositifs à ondes acoustiques de surface *(SAW)* [10]. On revanche, le SnO_2 est le premier oxyde métallique semi-conducteur qui a connu un développement technologique important depuis une dizaine d'années clôturé d'une excellente commercialisation *(dispositifs électroluminescents, panneaux d'affichage)* [11].généralement les oxydes métalliques permettent le dopage approprié a long terme par variétés espèces compensant ou inversant le type semi-conducteur vis-à-vis a l'application souhaitée [12]. Cependant ils sont facilement dopés « n », par contre il est très difficile de les doper « p ».

Dans le but d'aboutir aux applications citées ci-dessus nous nous sommes intéressés à l'élaboration et la caractérisation des couches de *TCO :* ZnO et SnO_2 par différentes techniques on montrera la possibilité d'obtenir des couches de type « p ». Voilà, c'est dans ce cadre que s'inscrit mon travail de mémoire dont il a été sub-divisé en trois parties :

La première partie est consacrée à l'étude des résultats relatifs à *l'effet joule* dans les couches minces de fer élaborées par le procédé *rf* avec différent temps de croissance. *La deuxième*

partie est consacrée à l'étude *(électrique et morphologique)* des résultats relatifs aux couches minces de ZnO et SnO_2 obtenues par le micro pipetage des précurseurs chimiques, ainsi que l'optimisation possibles des paramètres physico chimiques de cette technique. *La dernière partie* est consacrée à l'étude des résultats relatifs (électriques morphologiques, optiques) des échantillons ZnO et SnO_2 élaborés par le procédé *RF* par plasma d'air (N_2/O_2), mettant l'accent sur des simples comparaison entre les couches obtenues par plasma d'air (N_2/O_2) et celle obtenue par plasma d'argon *Ar* et l'effet de la juxtaposition des deux oxyde métalliques de type S/C différent.

III. Synthèse des travaux scientifiques réalisés en Doctorat ès sciences

III-1. Thèse de Doctorat

La thèse de Doctorat que j'ai soutenu au Département de physique, faculté des sciences, Université de Sétif 1 s'intitule :

« ***Etude ab initio des propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des perovskites $CaXO_3$(X= Sn, Hf) dans la phase cubique et orthorhombique*** ».

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé dans le laboratoire de recherche d'**E**laboration de **N**ouveaux **M**atériaux et leurs **C**aractérisation (**ENMC**) de l'Université de Sétif, L'exploration et l'étude des propriétés physiques fondamentales structurales, élastique, électronique, magnétique et optique par divers codes de calcul de premier principe, en particulier le module de calcul *CASTEP* de nouveaux matériaux faiblement abordées par les expérimentateurs fait en partie un parmi les principaux objectifs des recherches et des études menées à *« E.N.M.C »*.

Pendant les dernières années, quelques investigations expérimentales ont été consacrées à l'élaboration et à l'étude des propriétés physiques des agrégats perovskites solides de $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$ [13-18]. Les études menées à propos de ceux-ci ont montrés qu'elle font l'objet de nombreuses applications technologique (catalyse, luminescence, photoluminescence PL et thermoluminescence TL, détection de gaz, passivation électrique (diélectrique d'isolation)…etc [17], [19-23]. Malgré les nombreux travaux expérimentales et théoriques explorant les diverses propriétés physiques des matériaux perovskites oxydes, peu de travaux théoriques voir relativement manquants sur les composés $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$. Par conséquent, c'est dans ce cadre que s'inscrit notre travail de thèse qui vise à étudier les propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des composés perovskites cubiques et orthorhombiques $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$ y a compris l'effet de la pression hydrostatique. Et pour mener ce travail de genre calcul théorique, nous nous sommes opté pour une méthode de simulation qui représente à côté de l'expérience et de la théorie, un moyen d'accès supplémentaire à la compréhension des systèmes physiques.

Suite à quoi, nous avons traité dans cette thèse quelque propriétés physique des composés $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$ dans la phase cubique *Pm3m* et la phase orthorhombique distordue *Pbnm*. Brièvement, cette thèse était d'ordre fondamentales et bien évidemment nous avons focalisé notre

attention sur les propriétés structurales (paramètres de réseau, modules de rigidité et ses dérivées), les propriétés élastiques (constants élastiques, modules d'élasticités, vitesses de propagation des ondes élastiques de compression et de cisaillement et beaucoup plus la température de Debye), les propriétés électroniques (structure des bandes, densité d'états électronique, population des liaisons chimiques et charge de Mulliken échangées entre les atomes beaucoup plus la topographie bidimensionnelle de la densité de charge) et optiques (constantes diélectrique, réflectivité et l'indice de réfraction, seuil d'absorption). Tous les résultats sont ensuite étudiés sous l'effet de la pression hydrostatique appliquée graduellement jusqu'à 30 Giga Pascal.

Les travaux réalisés dans cette thèse de doctorat on fait l'objet de cinq publications internationales dont la suivante porte particulièrement l'ossature qui enveloppe les autres:

1) Structural, elastic, electronic and optical properties of the cubic perovskites $CaXO_3$ (X=Hf and Sn), ***Solid State Communications, Volume 150, Issues 7-8, February 2010, Pages 350-355***

D. Cherrad, D. Maouche, M. Reffas, A. Benamrani

Résumé:

Dans cet article on a étudié les propriétés structurales, élastiques, électroniques, et optiques des perovskites cubiques idéales $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$. Et pour arriver à concrétiser notre objectif, nous avons utilisé le pseudo potentiel ultra soft de Vanderbilt (US-PP) vu sa simplicité et ses avantages que celle de la norme conservée en particulier quand ils s'agit de l'étude des isolants et des semi-conducteurs. Pour cette raison que la méthode des ondes planes (PP-PW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT) est employée. On a utilisé deux approximations à savoir l'approximation LDA, l'approximation GGA pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation. En raison de la similarité des résultats obtenus par les deux approximations, on s'est contenté à représenter que les résultats de LDA.

2) Ab initio comparative study of the structural, elastic and electronic properties of $SnAMn_3$ (A=N, C) antiperovskite cubic compounds, ***Solid State Communications, Volume 150, Issues 15-16, April 2010, Pages 782-787***

D. Cherrad, D. Maouche, L. Louail, M. Maamache

3) Structural, electronic and optical properties of $SrHfO_3$ (I4/mcm, Imma, Cmcm, P4/mbm and P4mm) phases, ***Physica B: Condensed Matter, Volume 405, Issue 18, 15 September 2010, Pages 3862-3868***

D. Cherrad, D. Maouche

4) First principles calculations on elasticity, electronic structure and bonding properties of antiperovskites $ANTi_3$ (A = Al, In and Tl), ***Journal of Alloys and Compounds, Volume 509, Issue 12, 24 March 2011, Pages 4357-4362.***

Djellal Cherrad, L. Selmani, D. Maouche, M. Maamache

5) Influence of valence electron concentration on elastic, electronic and optical properties of the alkaline-earth tin oxides A3SnO (A=Ca, Sr and Ba): A comparative study with ASnO3 compounds Original Research Article

Physica B: Condensed Matter, Volume 406, Issue 14, 15 July 2011, Pages 2714-2722

Djellal Cherrad, M. Maouche, M. Maamache, L. Krache

IV. Synthèse des travaux scientifiques réalisés après le Doctorat ès sciences

IV-1. Publications internationales

Après la soutenance de ma thèse de doctorat, je me suis penché, dans un premier temps, sur la même thématique de recherche. Par ailleurs, en combinant entre le travail de la thèse et notre premier article publié, nous avons fondu un article plutôt étalé et détaillé concernant les perovskites $CaSnO_3$, $CaHfO_3$ cubiques et orthorhombiques. Bref, ce travail qui a consisté à étudier deux matériaux à large Gap différents tel que le $CaSnO_3$ et $CaHfO_3$ a permis dans le cas du premier d'accéder aux propriétés physique fondamentales et du deuxième de distinguer mécaniquement, électriquement et optiquement la variation des aspects physiques qu'elle pourrait apporter la distorsion orthorhombique à une perovskite idéale. En effet, cette étude a fait l'objet d'une publication internationale :

1) **Ultra soft pseudo potential investigation of fundamental physical properties of CaXO3 (X=Sn and Hf) distorted perovskites: A reference study to the perfect perovskites,** ***Physica B: Condensed Matter, Volume 429, 15 November 2013, Pages 95-105***
   Djellal Cherrad, D. Maouche, M. Boudissa, M. Reffas, L. Louail, M. Maamache, K. Haddadi, Y. Medkour

Résumé:

Les propriétés structurales, électroniques et optiques des perovskites $CaXO_3$ dans les deux phases cubique idéal et orthorhombique ont été étudiées. Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul des ondes planes (PP-PW) implémentée dans le code CASTEP qui se base sur La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Les valeurs des paramètres de réseau d'équilibre sont en accord avec les résultats expérimentaux disponibles. L'étude du comportement mécanique employant le rapport de *B/G* prouve que toutes ces perovskites sont malléables. Les phases cubiques possèdent des gaps indirects (R-G) et les orthorhombiques possèdent des gaps directs (G-G). Les cartes (110) de la densité de la charge électronique montrent que les perovskites orthorhombiques exhibent des chaînes de distribution électronique en zig zag rapprochées contrairement aux perovskites idéales présentant des chaînes parfaitement alignées (directionnelles). Une bonne corrélation élasto-électronique a été établie entre les constants élastiques directionnels individuels *Cij* et les liaisons chimiques covalentes et ioniques existante. La deuxième phase consisté à refaire toute l'étude sous l'effet de la pression hydrostatique. L'étude de

la dépendance en pression des constants élastiques et les enthalpies nous informe sur l'excellente stabilité mécanique de ces matériaux. La perovskite $CaSnO_3$ soit idéale ou distordue est très sensible à l'application de la pression. Les valeurs optiques indiquent que ces perovskites peuvent se servir dans des dispositifs de protection contre les radiations ultraviolettes.

En deuxième temps, en faisant le lien entre l'étude classique des matériaux (particulièrement les matériaux perovskites) en forme massif et celle de leurs surfaces. Mon dernier travail porte radicalement cette notion en son sein. Parallèlement, Je m'en suis orienté vers leurs magnétismes. Cette étude magnétique qu'on dispose et, précisément, qu'on y accès est tout à fait fondamentale. Dans ce contexte, seule l'état magnétique globale peut être prévu par exemple. Par ailleurs, toute coexistences de deux ou plusieurs modes magnétiques à l'état fondamentale réelle du matériau ne soit pas déclarer par le code employé. Mais ce surplus d'informations préliminaires peut être pris de la littérature expérimentale qu'ils soient adoptés ensuite dans notre travail de simulation. En outre, des simples calculs basés de l'analyse Mulliken nous permit la prédiction des moments magnétiques globale des matériaux et celui de chaque atome dont en constitue. Comme il reconnue l'identification des ces moments magnétiques est d'importance majeur dans quelques champs technologiques. Beaucoup plus d'analyse magnétique fondamentale nous permit de simuler le nombre d'électrons par rapport au nombre total de la maille d'étude dont il possède le spin up et celui ayant le spin down. Cette dernière simulation nous conduit à distinguer clairement la ou les espèces dominant le magnétisme de notre matériau en étude. En effet, cette étude a fait l'objet d'une publication internationale :

2) First-principles studies on (001) surface electronic bonding and magnetic properties of ZnCMn3 and ZnNMn3 intermetallic antiperovskites type compounds.

Journal of Alloys and Compounds, Volume 586, 15 February 2014, Pages 230-238

Djellal Cherrad

Résumé:

Nous présentons les propriétés mécaniques, électroniques et magnétiques des antiperovskites intermetallic cubiques $ZnCMn_3$ et de $ZnNMn_3$ en corps massif et en surfaces orientées selon la direction cristallographique (001). Les surfaces étudiées sont admises d'être les faces supérieures et extérieures des tétragonaux qui ont été aboutis suite à l'obtention des nouveaux blocs cristallins orientés (001). Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul des ondes planes (PP-PW) implémentée dans le code CASTEP qui se base sur La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le terme du potentiel d'échange et de corrélation (XC). Nos paramètres de mailles calculés sont avérés en accord avec les résultats expérimentaux disponibles. Contrairement au composé massif $ZnCMn_3$, le composé $ZnNMn_3$ rompe sa stabilité mécanique à environ 157 MPa en montrant une résistance très faible aux contraintes élastique de cisaillement. Beaucoup plus, on a bien révélé que la surface de $ZnNMn_3$

(001) s'est avérée légèrement stable que celle du composé $ZnCMn_3$. Plus d'investigations indiquent que les moments magnétiques calculés par atome de manganèse (*Mm/atom*) sont environ 2.62 et 2.82 μ_B en substituant, respectivement, l'atome de carbone C par celui de Nitrogène N. En utilisant la densité *TDOS* et le nombre total des états *TNOS* ainsi les nombres *PNOS* et les états partielle *PDOS* nous montrons que le moment magnétique par atome de manganèse est dérivés intégralement à partir des états Fe *d* à la proximité du niveau de Fermi. L'analyse de *TNOS* et *de PNOS* nous a permit de distinguer que le caractère métallique est assigné à la participation principale des spins Down (↓). Les moments magnétiques de la structure massive sont, respectivement, environ 7.02, 7.82 μ_B en remplaçant C par N qui sont légèrement conservé aux surfaces. Nos ponctuels résultat qu'on a trouvé sont cités brièvement en ci-dessous :

Dans cet article, nous avons présenté des résultats du calcul *ab initio obtenus sur* des antiperovskites de manganèse $ZnCMn_3$ et $ZnNMn_3$ en corps cristallin massif (ce qui est considéré comme étude classique) et en corps cristallins orientés selon la direction (001). Les deux corps cristallin massif et orientés selon la direction (001) ont montrés un caractère métallique en possession magnétique (état de spin polarisé) au niveau de Fermi E_F . Les corps cristallins orientés selon la direction (001) préservant plus de metallicity que les massifs et cela peuvent être considérés comme un avantage pour des applications technologiques. Les énergies calculées de découpage (cleavage) de la surface (001) que nous avons déduit sont 1.65 et 1.38 *N/m*, respectivement pour les composés $ZnCMn_3$ et $ZnNMn_3$. Ces valeurs suggèrent que la surface (001) du composé $ZnNMn_3$ soient quelque peu faciles à être découpé (dissocié) que celle du composé $ZnCMn_3$. Puisque nous avons obtenu des anomalies sur les valeurs des constants élastiques que nous avons obtenues pour le composé de $ZnNMn_3$, nous avons prêté plus d'attention pour identifier son comportement mécanique en utilisant quelques méthodes empiriques et semi-empiriques efficaces apportées de la littérature. En outre, nous avons constaté que nos systèmes en massif appartiennent tout à fait à la classe des matériaux aux liaisons hautement métallique. Le caractère métallique de la liaison Mn-Mn est lancé près du niveau de Fermi E_F à partir des états délocalisés du manganèse Mn *3d*. L'étude menée sur la densité d'état total *TDOS* et partielle *PDOS* aussi bien le nombre d'état total *TNOS* et partiel *PNOS* au niveau de Fermi E_F nous a permit de conclure que les états délocalisés ayant un spin down (↓) sont plus énergiques que ceux ayant un spin up (↑) dans tous les systèmes étudiés que se soit en corps massif ou bien en corps orienté (001). Cela nous a conduit à bien comprendre que le caractère métallique et magnétique, puisse être assigné à la participation majeure des états électroniques ayant le spin down (↓). Pour une compréhension plus profonde au sujet du comportement chimique des liaisons dominant la cohésion dans nos systèmes étudiés, nous définissons nos composés par leurs états finals de valence. Toutes les liaisons chimiques qu'on a pu définir ont été corrélées avec les constants élastiques C_{ij} calculés. Nous avons également constaté que les systèmes étudiés montrent un caractère de liaison mélangé qui peut bien être métallique, covalent et ionique. Au cours de cette

dernière analyse, on a pu, plus ou moins, comprendre l'anomalie mécanique que nous avons rencontrée sur le massif $ZnNMn_3$. Nous pensons sincèrement pour confirmer nos résultats obtenus dans un futur travail qu'il soit expérimental, en particulier ceux obtenus pour $ZnNMn_3$ systèmes.

IV-2. Projets de Recherches scientifiques

IV-2-a. Participation au projet de recherche CNEPRU :

D.Maouche, L.Louail, A.Roumili, **D.Cherrad**, A.Saoudi, M.Reffas.

« Etude Exploratrice des propriétés physiques fondamentales (structurales, élastiques, électroniques et optiques) des perovskites orthorhombiques Ca3GeO3 et CaGeO3 : étude comparative inspirée de la computation *Ab initio* ». Projet de Recherche Nº **D01220120057** (2012/2013).

V- Perspectives

Nous espérons dans la suite de ce travail, pouvoir entamé des projets expérimentaux accompagnés par des simulations numériques précieuses portant le jugement des travaux de recherche bien élaborés. Autrement, la simulation doit être le bien venu où l'expérience pratique devait être exécuté délicatement ou bien quand il est reconnu comme un handicap seurieux dans un tel cas.

Par principe, j'ai commencé ma carrière dans la recherche par la pratique précisément la physique appliqué. Au Magister, on a testé la sensibilité des couches minces de ZnO et de SnO_2 élaboré par plus q'une voie expérimentale envers la vapeur d'alcool (servi comme des couche sensible d'un capteurs à gaz). En outre, ces couches minces élaborées ont été testées envers les radiations ultraviolettes *UV* (servi comme des couches sensibles dans des capteurs *UV MSM*). Nous avons aussi passé par l'élaboration des couches minces métalliques de Fer (servi comme des minifours de chauffage opérationnel pour les capteurs à gaz). Par conséquent, l'effet joule de la chaleur dissipé afin de chauffé la couche sensible de TCO été le bute principal. Le contrôle des paramètres d'élaboration était notre enjeu basique afin d'avoir une bonne dissipation de chaleur (les minifours), une bonne sensibilité ainsi un court temps de réponse (capteur à gaz) et un bon photo conducteur envers les ultraviolettes (capteur UV MSM) ont été nos objectifs attendus. Au cours de la maîtrise des paramètres de dépôts on s'est remarqué que le plasma d'aire (N_2/O_2) peut renversé le type semi-conducteur de ZnO et SnO_2. Afin d'intervenir cette situation qui a été autant nouvelles et bizarres, on s'est proposé de faire des juxtaposition en jonction.

En deuxième phase de recherche en Doctorat, j'ai accédé le domaine de l'expérience virtuelle ou ce qu'on appelle la simulation numérique *Ab initio*. Malheureusement, cette simulation n'a pas traité mes orientations préférées. Mais elle reste un outil de base, de prédiction préliminaire avant toute expérience et aussi d'importance majeure pour jugé des expériences pratique.

Suite à quoi, mes futures intentions sont globalement sur la création d'une équipe de recherche formée de jeunes chercheurs qui prennent en charge des thématiques de recherches significatives pour le développement de la recherche dans nos sphères scientifique au niveau local et

national. En profitant de mes acquisitions dans les deux axes divergés de recherche, je souhaite vivement proposer des sujet de Master et de Doctorat soit disant orienté dans le domaine de la physique appliqué jugé par des simulation numérique *Ab Initio*. Aussi bien d'entreprendre des thématique de recherche national tel que : les PNR, et projets Nour21…etc.

VI. Synthèse des travaux pédagogiques réalisés avant et après le recrutement :

Au fil des cinq années passées j'ai occupé des postes pédagogiques en tant que vacataire avant d'être un enseignant permanant à temps plein au département de physique de l'université de Sétif. Brièvement, en deux fois j'avais l'opportunité d'être le responsable de module :

VI-1. Responsabilités Pédagogiques :

VI-1-a. Responsable de module de Phys1 et Phys 2 Durant l'année 2010/2011:

(Section d'environ 180 étudiants subdivisés sur 6 groupe de Travaux Dirigés)

J'ai géré ces deux modules semestriels durant cette année là au département de Génie des procédés. Ma responsabilité été de se charger à donner des cours ainsi d'élaborer les séries des exercices destinée aux étudiants de 1ère année licence des polymères où c'était l'année d'ouverture de cette filière nationale à Sétif. Dans ce cadre, j'ai pu faire régulièrement, en total, 8 chapitres en cours et 9 séries d'exercice avec. Par ailleurs, j'avais partagé la responsabilité de donner les travaux dirigés avec un autre enseignant, puis un troisième qui a élaboré et assuré les travaux pratiques.

VI-1-b. Responsable de module de Phys7 Durant l'année 2012/2013:

(Section d'environ 145 étudiants subdivisés sur 4 groupe de Travaux Dirigés)

J'ai géré ce module semestriel *(Physique de la matière condensé)* durant cette année là au département de Physique. Ma responsabilité été de se charger à donner des cours et des travaux dirigés ainsi d'élaborer les séries des exercices destinées aux étudiants de 3ème année licence Physique fondamentale. Dans ce cadre, j'ai pu faire régulièrement, en total, 3 longs chapitres en cours et 2 séries d'exercice avec. En bref, je n'avais pas partagé la responsabilité avec un autre enseignant en assumant toute la responsabilité.

VI-2. Assistanat Pédagogique :

Plus qu'une fois durant les derniers cinq ans, j'ai m'engagé à assurer des travaux dirigés TD et pratiques TP. Plus de détails à propos des dates et les lieux peut être consulté sur mon dossier administratif.

VI. Bibliographie

[1] *P. Hohenberg , W. Kohn, Phys. Rev. B 136,864 (1964).*

[2] *D. M. Ceperley , B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).*

[3] *J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, 3865 (1996).*

[4] *E.Engel, S.H.Vosko Phys. Rev. B47, 20 (1993).*

[5] *W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 1133, 140 (1965).*

[6] B.N. Mukashev et al, Superlattices and Microstructures 42 (2007) 103–109.

[7] Tudose et al, Appl. Phys. A 89, 57–61 (2007).

[8] X.G.Zheng et al, journal of luminescence.122-123(2007)198-201.

[9] Sylvie Faÿ ; *L'oxyde de zinc par dépôt chimique en phase vapeur comme contact électrique transparent et diffuseur de lumière pour les cellules solaires*, Thèse de doctorat de l'école Polytechnique fédérale de Lausanne (2003).

[10] T. L.Tansley et al, Thin Solid Films, 122-127(1984) 117- 19.

[11] M.B.Ouassini, *Etude et élaboration des couches minces de dioxyde d'étain pour application à la détection des espèces chimiques*. Mémoire de magister, U.S.T.O.M.B, 2005.

[12] Pierre MONTMEAT ; *Rôle d'éléments métalliques sur les mécanismes de détection d'un capteur de gaz à base de dioxyde d'étain. Application à l'amélioration de la sélectivité à l'aide d'une membrane de platine*, Thèse de doctorat. Saint-Étienne (2002).

[13] Chunhua Fan, Xinyu Song, Haiyun Yu, Zhilei Yin, Hongyan Xu, Guangxiang Cao, Deshan Zheng, Sixiu Sun, Materials Lett. **61** (2007) 1588–1591

[14] Sen Zhao, Ying Bai, Wei-Feng Zhang, Electrochimica Acta, **55** (2010) 3891–3896

[15] Y.B. Zhao, Z.J. Zhang, H.X. Dang, J. Phys. Chem. B. **107** (2003) 7574.

[16] Wanjun Wang, Jinhong Bi, Ling Wu, Zhaohui Li and Xianzhi Fu, Scripta Mater. **60** (2009) 186–189

[17] Zhouguang Lu, Limiao Chen, Yougen Tang, Yadong Li, J. alloy. Comp. **387** (2005) L1–L4.

[18] Zhengwei Liu, Yingliang Liu, Mater. Chem. and Phys. **93** (2005) 129–132.

[19] Bingfu Lei, Bin Li, Haoran Zhang, Wenlian Li, Optical Mater. **29** (2007) 1491-1494.

[20] Hongyan Yang, Yuji Ohishi, Ken Kurosaki, Hiroaki Muta, Shinsuke Yamanaka. J. of Alloys and Compounds **504** (2010) 201–204

[21] Y.W. Kwon, D.P. Norton, John D. Budai. Mater. Lett. **61** (2007) 3500–3503

[22] Weiyi Jia, Dongdong Jia, Teddy Rodrigueza, Yanyun Wang, Hua Jiang, Kewen Lic. Journal of Luminescence **122–123** (2007) 55–57.

[23] Y.M. Ji, D.Y. Jiang, Z.H. Wu, T. Feng, J.L. Shi, Mater. Res. Bull. **40** (2005) 1521.