

Conclusion générale :

Ce travail est une contribution à l'étude des propriétés structurales (paramètre de réseau, paramètre interne, positions d'équilibre, module de compressibilité et sa dérivée), les propriétés électroniques (structures des bandes, densité d'états électronique) des composés $CuGaX_2$ ($X=S, Se$) dans la phase chalcopyrites.

Les calculs ont été effectués par la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentée dans le code Wien2K. Et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation GGA-EPB.

- Pour les propriétés structurales :

Nos résultats concernant les propriétés structurales de l'état d'équilibre sont en bon accord avec les données expérimentales et meilleurs que ceux trouvés dans la littérature.

- Pour les propriétés électroniques :

Nos calculs montrent que $CuGaS_2$ et $CuGaSe_2$ ont un gap direct au point de haute symétrie Γ . Les valeurs calculées des gaps de ces composés en utilisant la GGA sont en bon accord avec ceux d'autres calculs ab initio.

Les résultats obtenus nous encouragent à poursuivre ce travail, où nous étudierons les propriétés optiques, ainsi que l'influence des défauts cristallins sur les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs $CuGaS_2$ et $CuGaSe_2$.