

Avis de soutenance de thèse

Spécialité : Physique de la matière condensée

Présentée par **Mme Juliana SROUR**

Pour l'obtention du grade de DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LORRAINE

Electronic structure and competition of phases in Cu-(In,Ga)-Se, Ga-Se and In-Se semiconductors: first-principles calculations based on different exchange-correlation potentials

Soutenance prévue le mercredi le **14 décembre 2016 à 14h00**

Amphithéâtre de l'ISEA

devant la commission d'examen composée de :

M Sorin Gheorghe CHIUZBAIAN, Université Paris VI	(rapporteur)
M Józef DENISZCZYK, Université de Silesie, Katowice	(rapporteur)
M Fouad EL HAJ HASSAN, Université Libanaise, Beyrouth	(co-directeur de thèse)
Mme Céline LÉONARD, Université Paris-Est	(rapporteur)
M Andrei POSTNIKOV, LCP-A2MC, Université de Lorraine	(co-directeur de thèse)

Thèse est préparée au sein de
Laboratoire de Chimie et Physique - Approche Multi-Echelles des Milieux Complexes
(LCP-A2MC) de l'Université de Lorraine
et l'Ecole Doctorale Lorraine de Chimie et Physique Moléculaire (SESAMES).

Afin de pouvoir utiliser les nouveaux matériaux semi-conducteurs dans les domaines de l'électronique et de l'optique, il faut parvenir à comprendre leur «structure électronique», ou plus précisément le positionnement des niveaux d'énergie des électrons impliqués dans l'absorption / émission d'un photon. Les propriétés électroniques, sensibles à la composition chimique et à la structure du matériau, sont théoriquement accessibles en résolvant les équations de la mécanique quantique sur ordinateur. Ce travail porte sur des simulations théoriques de la structure électronique de semi-conducteurs binaires constitués d'indium (ou du gallium) et de sélénium, ainsi que de leurs "dérivés" à base de cuivre. La stabilité relative des phases cristallographiques de certains composés In-Se et Ga-Se a été évaluée, ce qui a permis d'expliquer certaines tendances connues et de formuler des prédictions. Les résultats obtenus seront particulièrement utiles dans le domaine du photovoltaïque.